

平成 29 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」 調査研究報告書(公開版)

【研究題目】 計算科学とデータ科学の連携による実験データ高度解析手法の社会実装

【整理番号】 TK17-035

【代表機関】 東京大学（大学院理学系研究科／物性研究所）

【調査研究代表者（氏名、連絡先 TEL & Mail）】

常行真司 03-5841-4127 stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】

NIMS 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点：宮崎 剛

産総研機能材料コンピューショナルデザイン研究センター：三宅 隆

筑波大学システム情報系：櫻井鉄也

高エネルギー加速器研究機構：岩野 薫

【TIA 外連携機関】

・文科省/ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

・文科省/元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>

・文科省/計算物質科学人材育成コンソーシアムの構築事業

【報告書作成者】 常行真司

【報告書作成年月日】 2018 年 3 月 31 日

【連携推進（具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等）】

(1) 合同イベント

イベント名： 第 2 回” TIA かけはし” ポスター交流会

～計算科学とデータ科学の連携による実験データ高度解析手法の社会実装～

開催日時： 平成 28 年 8 月 30 日（火）13:30～17:30

会場： 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト

ショートプレゼン/1 階多目的ホール ポスター発表/2 階ラウンジ・205 号室

効果：計算科学、データ科学、数理科学の理論研究者や、それらの理論研究に対してニーズを持っている実験・計測研究者、および、プロジェクト間のコミュニケーションの場として、ポスター発表主体の研究交流会を行った。前半はショートプレゼンテーションを行い、後半はポスターセッションを実施した。合計 64 名の参加があり（NIMS：7 名、東大：34 名、筑波大：2 名、AIST：4 名、KEK：9 名、その他：8 名）、41 件の発表があった。今回は以下の分類で各課題を発表した（Data Science 5 件/Electronic State 8 件、Materials 8 件 Reactions & Dynamics 3 件、Miscellaneous 8 件、Experiment 9 件）。図 1 の Career Explorer ステッカーを用意し、希望する方のポスターに貼り付けて、若手のキャリアアップを支援した。時間的に余裕のあるプログラムを組み、通常の研究活動ではあまり接触することがない研究者間で十分に議論することを可能とした。アンケート結果より、本活動は異なる分野間の情報交換や新しい共同研究の芽を育む場として有効であるとの趣旨の複数の意見をいただいた。また、実験家の方から、「目的としていたビッグデータ解析に関する情報を理論家



図 1 Career Explorer ステッカー

から得られた」との声があり、本イベントの目的が達成されていた。さらに、本交流会をきっかけとして共同研究が開始されるケースもあった。要望として、企業や、計算機科学、数値計算の専門家の発表を増やして欲しい、提案として、ポスター賞を設けてはどうか、といったご意見をいただいた。今後、同様のイベントを行う際に参考にする。

(2) 計算科学・データ科学に関連するアプリケーションツールの講習会実施

以下の機関において、社会実装を視野に入れた計算・データ・計測関連のイベントを実施した。

<東京大学>

“TIA 連携講座”として物質科学計算アプリ講習会(定員 10 名)を 10 回実施した。合計 106 名(内企業 25 名)が参加し、特に第一原理計算アプリ OpenMX は 24 名中 18 名が企業からの参加であった。各講座で参加者から聴いたアプリニーズや普及活動への要望を、今後の活動にフィードバックする。

(実績) (1) 2018/3/5 : MateriApps LIVE! (9 名)、(2) 2018/3/2 : 3D プリンタ結晶模型製作 (10 名)、(3) 2018/1/26 : OpenMX (2 回) (10 名)、(4) 2017/12/20 : RESPACK (7 名)、(5) 2017/10/26 : xTAPP

(9 名)、(6) 2017/10/13 : OpenMX (1 回) (14 名)、(7) 2017/10/3 MateriApps LIVE! (8 名)、(8) 2017/8/30 : mVMC (11 名)、(9) 2017/7/20 : ALPS (14 名)、(10) 2017/6/29 : HΦ 講習会 (14 名)。

<産総研>

元素戦略プロジェクト(ESICMM)、ポスト「京」重点課題 7 (CDMSI)、MI²I との合同で月例磁石理論ミーティングを計 10 回開催。毎回 10 名程度が参加し、第一原理電子状態計算と情報統合手法について検討した。「京」Pj でアプリを開発し、産総研で立ち上げて TIA とも連携して研究会と実習を実施してきた企業 15 社が集う電気化学界面シミュレーションコンソーシアム活動を一般社団法人化し、社会実装を完了した。

<筑波大—NIMS>

大規模電子状態計算と情報科学の協働に関して、情報交換会を 8 回開催。毎回、筑波大と NIMS のグループから 5 名程度が参加。マテリアルインフォマティックスのチュートリアル 3 回、セミナー 3 回を実施し、合計 360 名の参加を得た。

【調査研究内容】

平成 29 年度の活動を通し、「計算科学」と「データ科学」の連携で取り組むべき物質材料の課題明確化と解決に向けた解析手法、ツールの調査を以下の通り行うことができた。

1) アプリ利用者から、物性研がアプリ開発者の一角を担っていることは継続性や信頼性の担保になるとの意見をいただいた。今後はアプリ単独ではなく、データ科学との連携による物質科学の新しい解析の手法として講習会を行っていくことが、飛躍的な普及の鍵になることがわかった。

2) CONQUEST を中核とした国際連携によるアプリ開発・整備と普及に関する調査研究を推進した。

3) 材料開発に携わる複数の企業研究者から、実材料モデリングの起点としての第一原理計算の重要性と、汎用コードで扱えない物理量の算出や計算・実験を合わせたデータ同化など手法の多機能化・高度化に期待する意見が寄せられた。

4) TIA ワークショップのポスターセッションでの研究交流から材料分野の研究者との共同研究をスタートし、その成果が高性能計算分野のトップカンファレンスでの論文発表につながった。

5) 固体、特に分子性結晶の格子振動モードの特定やその IR スペクトルの計算は、最近進展が目覚ましいテラヘルツ光・中赤外光誘起現象の理解に本質的であるが、これまでほとんど行われてこなかった。KEK では、東大新領域の実験グループの依頼を受けて第一原理計算手法の調査を行い、その最初のテストとして或る物質で良い再現結果を得た。

【今後の課題】

計算・データ科学アプリ・ツールの社会実装活動で参加者から得た意見やニーズを踏まえ、今後は企業参加者から参加料を徴収する等で活動財源の確保を行い、TIA 連携講座等を継続する予



定。また、調査の結果、ニーズとして、計測データと計算データを同化させ、物質材料の探索を迅速に実施する革新的な物質科学解析手法があることがわかった。今後、物性研や東大情報基盤センターの計算資源、SINET5、アプリポータル“MateriApps”、NIMSの物質科学データベース“Matnavi”等を活用し、KEK-PF等から得られる計測データと、データベースやAI技術を活用した計算データを同化させた手法開発に関して、国Pjに提案することを検討予定である。

以上