

平成30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】 計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査

【整理番号】 TK18-029

【代表機関】 東京大学 物性研究所

【調査研究代表者(氏名)】 尾崎泰助

【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
筑波大学人工知能科学センター:	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)(CDMSI)/ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」/
計算物質科学人材育成コンソーシアム構築事業(PCoMS)/元素戦略Pj<研究拠点形成型>

【報告書作成者】 尾崎泰助

【報告書作成年月日】 2019年3月29日(金)

【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: ”TIAかけはし”ポスター交流会2018
～計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査～
開催日時: 2018年12月3日(月)13:00～19:00
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:「計算と計測のデータ同化」をキーワードに計算科学、データ科学、数理学の理論研究者や、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48名が集った(NIMS:7名、東大:29名、筑波大:1名、AIST:1名、KEK:4名、企業:5名、その他:1名)。前半は1分間の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。今回は25件の発表があった(Data Science 6件、Electronic State 4件、Materials 10件、Reactions & Dynamics 2件、Miscellaneous 4件、Experiment 4件)。例年通り、Career Explorerステッカーによる若手研究者キャリアアップ支援も実施した。定着した本イベントは、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ている。昨年度より本交流会をきっかけとして共同研究も開始されており、懇談会の場においても、ざっくばらんな議論がなされており、分野、組織を超えた交流を行うことができた。

(2) 計算と計測のデータ同化に関連する各機関の連携推進活動
<東京大>

NIMS、KEK、J-PARC、SPring-8の実験研究者へデータ同化に関連するヒアリングを実施してニーズを把握し、文科省情報担当主幹で公募のあった「次世代領域研究」Pjにデータ同化課題で提案した。採択には至らなかったが、研究実施の枠組みは構築出来たので、2019年度に適切なPjに再提案予定。

物質科学に関連したアプリケーションソフトウェア講習会をTIA連携講座として9回実施。合計100名程度の方々が参加し、ポスト「京」Pj等で開発している最先端の計算科学技術を習得した。

2019年2月8日(金)に、HPCI主催のワークショップ～第一原理計算と実験のデータ同化による材料開発手法～に協賛企業70名含む100名の参加者を得た。天気予報で先行するデータ同化手法、NIMSにおけるデータレポジトリの講演を行った後に、「計算と実験のデータ同化で何かできるのか」と題したパネルディスカッションを企画し、議論した結果、産業界から適用例を早く示して欲しいとの要望を受けた。

<NIMS>

マテリアルインフォマティクスのハンズオン10回（40人x10回=400人）、チュートリアル2回（第1回80名、第2回100名）を実施し、合計580名の参加を得た。また、大規模第一原理計算アプリCONQUESTの公開に向けたセミナーを開催した。（40名参加）

<筑波大-NIMS>

大規模電子状態計算と情報科学の協働に関する情報交換会を10回開催（筑波大とNIMSのグループから各5名程度参加）。共同研究につながる議論を行うことができた。

<KEK関係>

2018年10月31日-11月2日、KEK素核・物性連携プログラムにおいて主として量子エンタングルメントの集中講義を実施した。量子エンタングルメントが素核・物性の両分野にまたがる共通の概念として確立しつつある現状をよく共有出来た。

2019年1月14日-16日、KEK素核・物性連携プログラムにおいて研究会「量子多体系の素核・物性クロスオーバー」を企画、実施した。素核と物性の第一線の研究者（理論および実験）が一堂に会し、多体問題の今後について集中的な議論が行われた。

2019年3月8日、第4回TIAかけはし光・量子計測シンポジウムにKEK研究者も数名ポスター発表を行った。様々な最先端の計測技術、及びそれに対して理論が出来る事について突っ込んだ議論を行った。

【調査研究内容(実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果)】

<東京大>

実験とシミュレーションの「データ同化」による新しい結晶構造手法の探索を行った。実験で得られるX線回折データが従来の構造解析手法には全く不十分であった場合でもどの程度単結晶に近いかという「結晶化度」を定義し、原子間ポテンシャルエネルギーのシミュレーション結果と組み合わせることで構造予測が可能となることがわかってきた。例えば、SiO₂の多形やダイヤモンド、硫化水素などの物質にこの手法を適用し、100以上の原子を含むような大きな計算セルに対しても、高い確率で正しい構造が推定された。このように、複数のコスト関数の同時最適化問題に対する新しい最適化手法を開発することで、アニーリング法などの「メタヒューリスティクス」に頼らず、効率よく最適解を探索できることがわかった。

<NIMS>

1)企業研究者から、実際に機械学習によって材料特性を解析するための一連の手順（ワークフロー）が分かりにくいこと、データ数の少なさが指摘された。そこで、NIMSの公的データベースを用い、データの前処理・クレンジング、学習モデル構築、転移学習による少数データセットの活用という一連のワークフローに対する調査、検討を行なった。今後、計測データを含めた各種データをデータ同化や転移学習によって活用することが期待される。

2)国際連携により開発されたCONQUESTの公開に向けてアプリ整備と必要な手続きの調査を行なった。

3)NIMS-MI²関連アプリ(COMBO、iqspr、XenonPy、CrySPY)を物性研が運用するMateriAppsに登録した。

<筑波大>

筑波大とNIMSとの大規模電子状態計算と情報科学の情報交換会の成果として、アモルファスの状態判定を機械学習する手法について進展があり、その成果を発表するために論文をまとめている。

<KEK>

分子性結晶はその興味深い性質（電荷秩序、超伝導、スピン液体など）にもかかわらずその単位胞が大きいため測定結果を定量的に再現する第一原理計算は難しかったが、局在基底及びハイブリッド汎関数の組み合わせで実験の解析に役立つデータを得つつある。2018年度はある水素結合系でフォノン分散の計算を行い、特徴的な分散を発見した。本結果は第4回TIAかけはし光・量子計測シンポジウムにて報告し、実験研究者とその観測の可能性について議論を行った。今後、特徴的なフォノン分散を特に中性子非弾性散乱で測定して貰う目的で必要な働きかけを行っていきたい。

【今後の予定】

文科省HPCI推進委員会において、データ活用社会の課題の中で、計算科学で創出される品質の高いデータをどのように活用していくのが、国際競争力強化策として重要との見解が示されている。物質材料系の実験と計算のデータ同化で、世界を先行するためにも、2019年度にPj獲得を目指していく。

以上。