

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

Innovation in materials analysis by data assimilation of simulation and measurement

目的 Purpose

- ◆物質構造や機能の効率的な探索を目指し、物質材料シミュレーションと実験・計測のリアルタイムデータ同化による物質探査手法を調査
- ◆化学反応経路探査等の理論的解釈や物性影響因子特定を目指し、長時間物性シミュレーション限界をデータ同化でブレークスルーする手法を調査

方法 Method

- ◆革新的大規模研究施設から得られる物質構造特性、化学反応の膨大なデータと最先端アプリで計算されるデータをリアルタイムに同化
⇒
 - ・データに含まれている重要情報を顕在化
 - ・信頼性の高い解析結果が迅速に得られることが期待

展望 Prospect

- ◆物質科学データベースと連携して革新的なデータ同化による材料探査手法提供プラットフォームを構築し、産学の国際競争力を強化へ。
- ◆開発するデータ同化解析手法は、計測、計算、通信、データのインフラが一体となった物質科学研究の新システムの核として世界的に普及へ

新しいデータ同化最適化手法の開発 (COM)

Combined Optimization Method ; COM

共通の最小点を持つ一方、局所最適点分布は異なる2つのコスト関数 $[f_1(x), f_2(x)]$ の最小点を探索

<従来>

コスト関数の和 $f_1(x)+f_2(x)$ の最小点を探索する
⇒極小点がたくさんあり、最小点を見つけるのは困難

<新手法 (COM)>

値ではなく勾配情報に着目 (値増加(+), 値減少(-))
勾配が $+ \leftrightarrow -$ に反転した場合が局所最適点
⇒ $f_1(x)$ 、 $f_2(x)$ に共通する局所最適点が最小点で確定

***実験と計算のスペクトルデータ同化に有効**

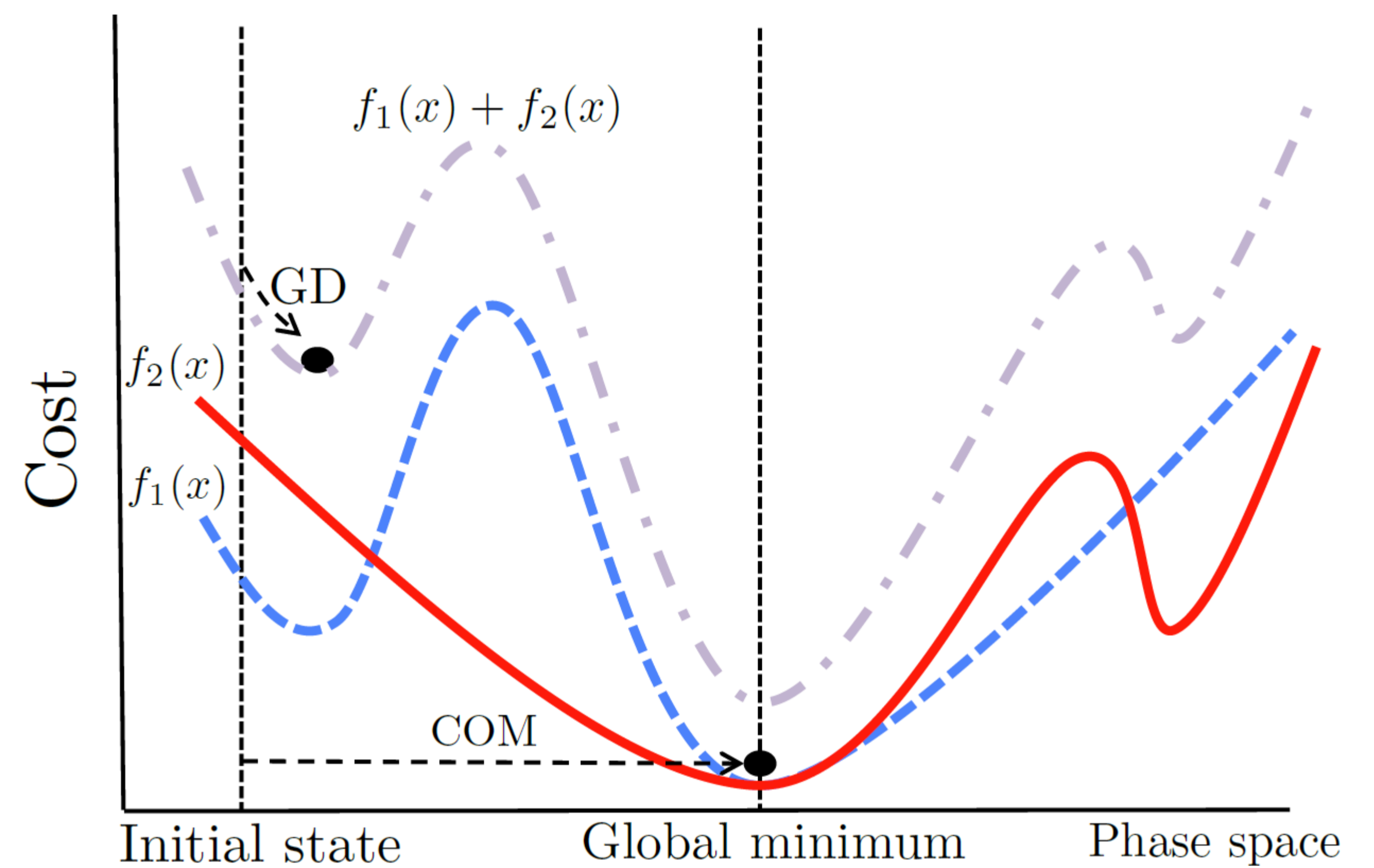


図 COM手法の概念

高精度高品質データを生成する物質科学計算プログラムの振興 (MateriApps)

A Portal Site of Materials Science Simulation ; MateriApps

数十万原子以上の超大規模計算を可能とする
オーダーN法第一原理計算ソフト : CONQUEST公開!

NIMS 宮崎剛 MIYAZAKI.Tsuyoshi@nims.go.jp

⇒簡単にアプリが試せるパッケージMateriApps LIVE!にインストール

⇒利用者拡大のための整備完了

対象 : ナノ構造物質 (半導体表面、酸化物表面)、生体物質、界面、触媒



「計算物質科学ソフトウェアの開発技術の振興」2019年4月9日
文部科学大臣表彰科学技術賞 (科学技術振興部門) 受賞。

・アプリ登録数: 273件・ユーザ数: 約7,000名
・PV数: 約20,000件/月・海外アクセス: 約30%