

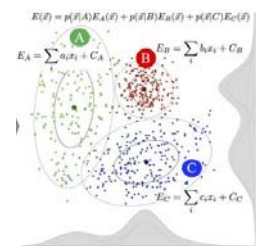
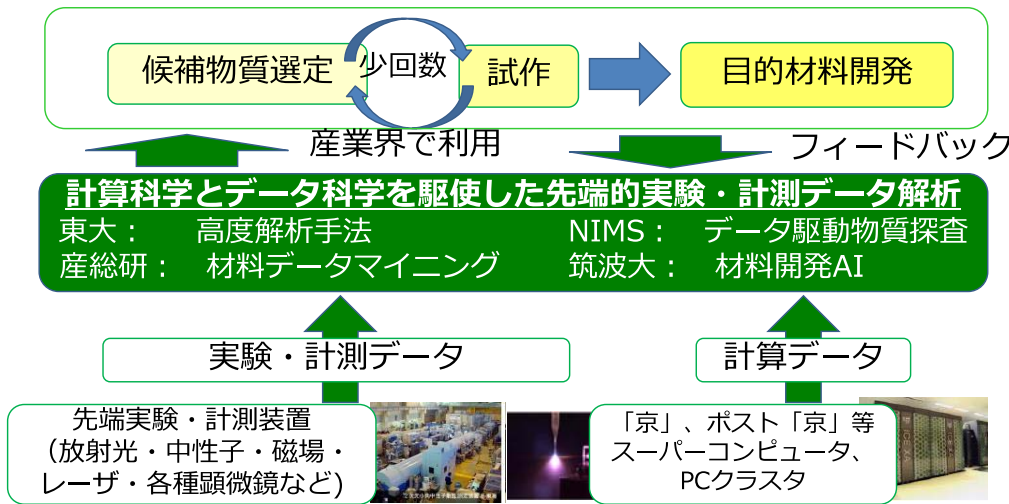
# TIAかけはし：計算科学とデータ科学の連携による実験データ高度解析手法の開発（1/2）

## 概要

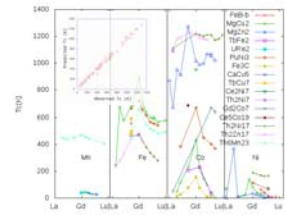
先端的な大型実験装置から出力される未利用ビッグデータに対して高度なデータ解析を実現し、物質・材料の深い理解と材料設計につなげるため、計算科学のシミュレーション手法とデータ科学的手法の連携による解析スキームの在り方について調査研究を行う課題です。実験研究者のニーズと理論研究者のシーズのマッチングを図ることで、今後のアプリ開発の方向性を探るとともに、両者の連携を継続的に促進するため、各種アプリの公開、維持管理および情報提供手法を検討します。

- ☆ 計算科学とデータ科学を駆使し、先端的実験・計測データの高度解析手法を開発
- ☆ 未利用ビッグデータ解析により物質・材料の深い理解と材料設計へ
- ☆ 物質・材料開発に関する実験・理論連携を継続的に促進する情報共有手段を検討

## 迅速な材料開発で社会を支える材料・デバイス事業競争力強化



原子間相互作用エネルギー（計算値）のクラスター解析



不純物種別と磁性体キュリー温度（実測値）の回帰分析

## 参加機関

東京大学、物質・材料研究機構、産業技術総合研究所、筑波大学（高エネルギー加速器研究機構も参加予定）

## 今年度の活動より

“TIAかけはし”ポスター交流会～計算科学・計測技術・インフォマティクスの融合によるインテリジェント解析～  
平成28年8月30日（火）13:30-17:30 於 エポカルつくば

ポスター発表 + ショートプレゼンテーション  
全65件（参加者 91名）

- 広い意味でデータ科学的手法を使った研究 19件
- 電子状態計算の手法開発、アプリ公開 10件
- 特定の物質・材料のシミュレーション 16件
- 化学反応や動力学のシミュレーション 6件
- ツール、数値計算手法、アプリ普及 6件
- 実験手法、実験 8件



- 「若い人が多かったのが印象的で、頼もしく思いました。」
- 「計算科学やインフォマティクスの近況を知ることができた。」
- 「新しい研究材料が見つかった。」
- 「It was great event. But a bit too short.」
- 「理論およびデータ科学を必要とする実験家の方々のお話が伺えた。」

ショートプレゼンテーション資料より

- [D8-01]** Construction of interatomic potential based on Gaussian mixture model. Authors: T. L. Head, H. Kawai, B. Trakul, J. Hwang, and H. C. Duan.
- [D9-14]** Alternating Optimization Method based on Non-negative Matrix Factorizations for Deep Neural Networks. Authors: Tetsuya Sakurai, Akira Imamura, Yuto Inoue, Yasuhiro Futamura, University of Tsukuba.
- [E5-04]** A neural network approach to adsorbed structures of water molecules on an oxide surface.
- [E5-07]** Development and Applications of large-scale first-principles calculation method. Authors: T. Wada and S. R. Badar.
- [RD-01]** First-principles simulation tool for electrochemical reactions. Authors: Masaru OTSUNO ET AL.

# TIAかけはし：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開発 (2/2)

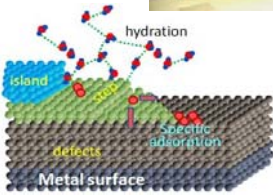
## 参加機関（中心組織）の持ち味は？

### 東大（物性研究所）

共同利用  
スパコン



東大柏キャンパスにある物性研究所は、全国の物性研究者に共同利用スーパーコンピュータを提供し、大学間連携による人材育成活動の支援、研究者の交流促進、国産ソフトウェアの開発・普及支援など、様々な分野振興活動を行いながら、高度解析手法や計算アルゴリズムの開発に取り組んでいます。ポスト「京」コンピュータのアプリ開発プロジェクトでは、デバイス・材料課題の中核拠点として活動しています。



燃料電池白金触媒反応の  
第一原理シミュレーション

物質科学アプリポータルサイト  
MateriAppsによるアプリ普及支援

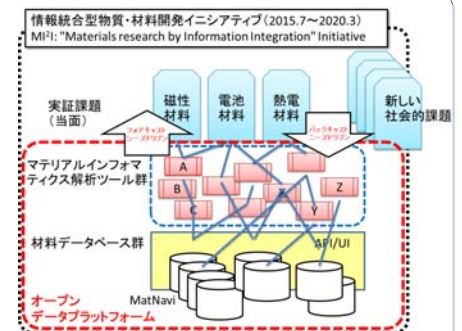


### 物材機構（CMI<sup>2</sup> / MI<sup>2</sup>I）

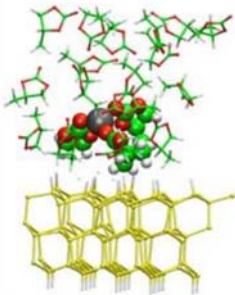
物材機構（NIMS）では従来より統合材料データベースMatNaviを運用しています。2015年4月には情報統合型物質・材料研究拠点（CMI<sup>2</sup>）を設置し、2015年7月よりマテリアルズインフォマティクス拠点化事業であるMI<sup>2</sup>I（Materials Research by Information Integration Initiative）を実施しています。MI<sup>2</sup>Iという産官学の人材糾合の場において

- MatNaviをもとにした世界最大規模の高機能材料データベースの構築・運用
- マテリアルズインフォマティクス解析技術の研究開発とツール群の整備
- 磁性材料、電池材料、熱電材料で実証

を実施し、材料分野のオープンデータプラットフォームとして活動を進めています。

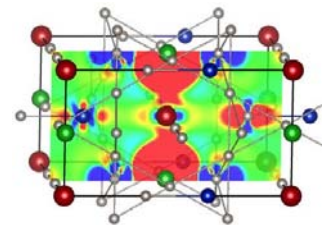


### 産総研（CD-FMat）



Liイオン電池における充放電の  
原子レベルシミュレーション

機能材料コンピューショナルデザイン研究センター（CD-FMat）では、原子・分子からマクロ構造までを俯瞰するマルチスケールシミュレーションを目指し、機能性材料の高効率な設計基盤技術の研究開発を行っています。「TIAかけはし」では、原子配列や化学組成などの基本情報から、各種の実験・計測結果と直接比較できるデータを計算するために必要な、シミュレーション手法と、その基盤となる数理科学的手法に関して検討調査を行っています。



希土類磁石化合物  
NdFe<sub>11</sub>TiNにおける窒化  
による電子密度変化

### 筑波大（システム情報系）

筑波大学システム情報系では、大規模スパース行列を対象とした線形方程式や固有値問題などの数値計算手法の開発、部分空間を用いた画像認識手法の開発、各種の機械学習アルゴリズムの開発を行ってきました。また、筑波大スーパーコンピュータPACS-IXや理研「京」コンピュータを対象として、

- 大規模シミュレーション高速化のための数理手法
- 高次元データ解析のための機械学習による手法

の開発を進めています。現在、シミュレーションと実験から得られる大量のデータの解析手法の検討を進めています。また、本連携プログラムの参画機関との情報交換・研究交流を行うことで、新物質・材料開発における人工知能技術の適用について検討を行います。

