

数学協働プログラムと連携したセミナー「MI² (情報統合型物質・材料開発) と数学連携による新展開」2016.2.26 開催を起点として

MI²I チュートリアルセミナー (第1回)

日時：2016年3月29日(火) 13時30分～17時

場所：JST 東京本部 B1 ホール

http://www.jst.go.jp/koutsu_map.html

【趣旨・目的】

情報理論や数学の手法はこれまでの物質・材料研究の方法に新しい展開をもたらすことが期待される。しかし、実際にそれらの汎用手法を具体的な物質・材料の課題に適用するためには、物質・材料研究者の側から言えば、情報理論や数学の手法が何を可能とするのかを理解する必要がある。

本チュートリアルセミナーは、これらの課題解決に向けて、物質・材料分野に情報理論や数学を取り入れるきっかけとするために企画され、初歩的な考え方や実際の事例紹介を通じ、まだ情報統合型物質・材料研究に慣れていない研究者を対象としている。

本チュートリアルセミナーの内容は、教材用ビデオ映像に編集され、情報統合型手法を取り入れていくべき分野の若手研究者や、材料分野を専攻する学生等、広く配布して、情報統合型物質・材料研究の人材育成に活用していく予定である。

【プログラム】

13:30 – 主旨説明 寺倉清之

(物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 拠点長)

13:40 – シミュレーションとデータ解析の融合計算の基礎

樋口 知之

(統計数理研究所 所長)

14:30 – 位相的データ解析の機械学習的方法とその物質科学への応用

福水 健次

(統計数理研究所 統計的機械学習研究センター センター長・教授)

休憩 15:20 – 15:40

15:40 – ベイジアン・アプローチに基づく情報統合型物質・材料探索

吉田 亮

(統計数理研究所 モデリング研究系・データ同化研究開発センター 准教授)

16:30 – 質疑・議論

閉会 17:00

主催：情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）

共催：科学技術振興機構（JST）

後援：統計数理研究所（※）

※本チュートリアルセミナーは、文部科学省委託事業 数学協働プログラム（受託機関：統計数理研究所）からの支援を得て企画・開催されています。

協賛：北陸先端科学技術大学院大学

*本チュートリアルセミナーは、

・JST さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」

・計算物質科学人材育成コンソーシアム、東北大学金属材料研究所からの協力も得ています。

連絡先・問い合わせ先：

物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点

mi2i-adm@ml.nims.go.jp

【趣旨・目的】

全文

物質・材料研究が扱う課題を、物質・材料探索から企業での適用研究開発までを次のように4つのステージに分類することができる。

課題はSTAGEで異なる

	STAGE I 新物質創成 <small>例) C₆₀</small>	STAGE II 物性極値化 <small>Materials Genome</small>	STAGE III 材料最適化 <small>Integrated Computational Materials Engineering</small>	STAGE IV 適用研究開発
内容	従来の特性限界超物質探索	結晶構造あり 元素置換 ドープ 極値を探す	材料化 プロセス・組織構造 の最適化	システム設計 試作実証 信頼性確保
ポイント	コンセプトひらめき 実験発見 Abduction	傾向予測と実験 Deduction Induction	実験検証 特性トレードオフ克服 Induction主体	Virtual Prototype シミュレーション Deduction
データ共有	Unknown OPEN 知識	OPEN 一部CLOSE 物質データベース	特性CLOSE/OPEN プロセスCLOSE	固有材料CLOSE 一般材料OPEN
MIの期待	逆問題 特性→構造予測	結晶構造・特性相関 QSPR	特性・組織相関 プロセス・組織相関	短期間化 (時間、費用)
課題	方法論研究	事例研究 手法選択	組織構造データ化 データ形式統一 (メタデータ)	各種シミュレーション

レシピ+支配方程式

出口

それぞれのステージの研究開発において、これまでもより有効で効率的な研究手法の探索が行われてきたが、世界における研究の進展状況から判断して、我国での研究開発の一層の効率化が強く求められている。そのためには経験と勘に多くを頼る従来のやり方から、より系統的で、統一的な研究の進め方へと変革しなければならない。また、異なるステージの間では、扱う対象が大きく異なっており、空間スケール、時間スケールも大きく異なるため、異なるステージ間の交流が困難であることが、基盤研究と産業との間の情報交流を阻害する原因ともなっている。物質・材料研究におけるこうした困難を打開するために、情報・数理の手法を駆使して、蓄積されたデータを有効に活用することを目指したマテリアルズ・インフォマティクス（以後は情報統合型物質・材料研究（：MI²と略記）と言う）の推進が世界的な潮流となっている。

物質・材料研究では、従来の実験・理論・計算科学が強力な研究の手段であったため、殆どの研究者は情報理論や数学における進歩に注意を払わなかった。この状況は、MI²の概念が広まるにつれて大きく変わろうとしている。情報理論や数学の手法はこれまでの物質・材料研究の方法に新しい展開をもたらすだけでなく、その汎用性により4つのステージの共通基盤の役割を果たすことにより、異なるステージ間の交流を活性化することも期待される。しかし、実際にそれらの汎用手法を具体的な物質・材料の課題に適用するため

には、物質・材料研究者の側から言えば、情報理論や数学の手法が何を可能とするのかを理解する必要があり、情報・数学の側から言えば、具体的な課題の目的や問題点を理解する必要がある。即ち、異なる分野の研究者間の情報交流、意見交換の場を設定することが求められる。

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）では、上述のような異分野間の情報交流を促進するために、「情報統合型研究交流会」と称するセミナーシリーズを頻繁に開催している。その内で、プロジェクト内に限らず、一般に広く公開するものを、年に数回開催する計画である。ただし、それらはMI²Iプロジェクトのそれぞれの時点でのスコープの枠内で行われる。2/26に開催された数学協働プログラムワークショップ（WS）「MI²（情報統合型物質・材料開発）と数学連携による新展開」はそれらに対比すると、「一歩先を見た」ものであり、今後の具体的な連携の可能性を開拓するためと位置付けている。本WSで得られる知見を吟味し、プロジェクトとの具体的な連携の可能性を更に追求するため、個別にMI²Iプロジェクト内公開の「情報統合型研究交流会」を活用して継続的に情報交流を行っていく。また、それらの情報交流の進展状況に応じて、一般公開版として講演会を開くことも検討する。さらに、物質・材料分野における数学協働を加速するため、物質・材料科学に特化した入門セミナーを定期的で開催し、情報統合型の裾野を広げて行く予定でもある。

・解決すべき課題

MI²Iプロジェクトでは、以下に示すようにエネルギー問題の解決に重点をおき、社会的に重要な具体的な課題を設定している。

蓄電池（全固体・多価イオン）材料、磁石材料、スピントロニクス材料、伝熱制御材料、熱電変換材料

また、これらの具体的な課題の遂行を支援するとともに、物質・材料研究一般への適用も視野に入れて、情報理論、数学の考え方や方法を取り入れて、MI²の可能性を探求する活動も行っている。しかし、現在のプロジェクトの体制でカバーできる範囲は自ずと限定的であるため、プロジェクト外も含めたより広い研究コミュニティとの連携を図ることによって、情報統合型研究の物質・材料研究における可能性をより拡大し、深化させたい。数学協働における解決すべき課題は、次の2点である。

- 1) 既に設定されている課題を遂行するための、より有力な考え方や方法を探る。
- 2) 現時点でのプロジェクトのターゲットは「趣旨・目的」の冒頭に示したステージⅠから、せいぜいステージⅡの一部に絞られている。これを、ステージⅢに繋ぎ、ステージⅣへ進化させていくために有効な新研究要素を探る。

本チュートリアルセミナーは、これらの課題解決に向けて、物質・材料分野に情報理論や数学を取り入れるきっかけとするために開催する。チュートリアルの言葉通り、初歩的な考え方や実際の事例紹介を通じ、まだ情報統合型物質・材料研究に慣れていない研

究者を対象とした入門編として開催する。

本チュートリアルセミナーの内容は、すべてビデオ映像化し、教材用に編集する予定である。参加したいが不参加となった方々や、物質・材料分野や計算科学など、情報統合型手法を取り入れていくべき分野の若手研究者、あるいは材料分野を専攻する学生等、広く配布して、情報統合型物質・材料研究の人材育成に活用していく予定である。