

超並列データ駆動科学による革新的計測データ解析

Novel measurement data analysis by massively parallel data-driven science

星健夫

核融合科学研究所

1. 研究目的

本課題の大局目標は、富岳までを活用し、先端計測の実験データ解析に革新をもたらすことで、核融合科学・物質科学・プラズマ科学にイノベーションを実現することである。近年、機械学習による自動最適化により各種測定技術が躍進し、データ取得が飛躍的に容易になった。しかし先端測定では、データ解析（測定データから知見を抽出する作業）を熟練研究者の試行錯誤に頼ることが多く、ボトルネックとなっている。これをスパコン上のデータ駆動科学に置き換え、計測革新をもたらす。

基盤となる自作解析ソフトウェアは「2DMAT」（2025 年から ODAT-SE に改称）として公開されている (<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>)。特に、超並列モンテカルロ法（Population Annealing Monte Carlo 法）に基づくベイズ推定を中心とした。本研究は、望月出海(KEK)、高草木達(北大触媒研)など、実験系研究者との共同研究である。並行する富岳利用課題（hp240304）も併用し、数千ノード以上の超並列計算は富岳をもちいた。

2. 研究成果の内容

- (1) 物質科学への適用～二次元物質構造解析向け量子ビーム回折実験のデータ解析：**全反射高速陽電子回折実験(Total reflection high-energy positron diffraction, TRHEPD, トレプト)を対象として、 3×3 -Si-Al(111)表面の構造解析を行なった[1]。大域的な探索をすることにより、従来予想されていた構造とは異なる構造を見つけることができた。さらに、プログラムの拡張により、触媒表面構造解析向け偏光全反射蛍光-X線吸収微細構造(Polarization Dependent Fluorescent X-ray Absorption Fine Structure, PTRF-XAFS)実験の予備的応用研究も行なった[2]。
- (2) 核融合科学・プラズマ科学への拡張：**ベイズ推定は汎用であるため、どう手法を核融合科学・プラズマ科学へと拡張した[3]。
- (3) プログラム講習会：**ソフトウェアのユーザーを増やすため、実験系研究者を想定した講習会を開催した[4]。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

プログラムは超並列型計算機を前提としており、Wisteria-o 上でプログラム開発・

チューニングを行うことで「富岳」とのシームレスな大規模研究ができた。

4. 今後の展望

本研究の発展として、ムーンショット目標 10 プロジェクト「超次元状態エンジニアリングによる未来予測型デジタルシステム」(2024 年 11 月～、代表：星健夫、<https://ms10ds.nifs.ac.jp/>) がスタートした。上記プロジェクトを中心に、核融合科学・物質科学・プラズマ科学のイノベーションを発展させていく。

5. 成果発表

(1) 学術論文

[1] Surface structure of the 3×3-Si phase on Al(111), studied by the multiple usages of positron diffraction and core-level photoemission spectroscopy, Yusuke Sato, Yuki Fukaya, Akito Nakano, Takeo Hoshi, Chi-Cheng Lee, Kazuyoshi Yoshimi, Taisuke Ozaki, Takeru Nakashima, Yasunobu Ando, Hiroaki Aoyama, Tadashi Abukawa, Yuki Tsujikawa, Masafumi Horio, Masahito Niibe, Fumio Komori, Iwao Matsuda, Physical Review Materials 9, 014002 (2025).

(2) 学会発表

[2] データ解析フレームワーク 2DMAT による PTRF-XAFS 計測のベイズ推定、中野陽斗、星健夫、高草木達、日本応用物理学会 2025 年 3 月 17 日。

[3] 荷電交換分光計測モデリングとベイズ推定を用いた逆問題解析、小林達哉、星健夫、中野陽斗、佐々木真、金史良、吉沼幹朗、居田克巳、日本物理学会 2025 年 3 月 20 日

(3) その他

[4] 2DMAT 講習会-CCMS Web ハンズオン-,東大物性研/ハイブリッド開催, 2024 年 12 月 2 日; <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/7002>

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus				
Pegasus				
Wisteria/BDEC-01	○	200,000		0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				