

計測インフォマティクスを中心とした学際展開

星健夫(1,2), 境健太郎(1), 中野陽斗(1,2)

(1)NIFSプラズマ量子プロセスユニット, (2) 総研大

- ・背景:4つのインフォマティクス
- ・汎用データ解析(逆問題解析)フレームワーク
ODAT-SE(旧称2DMAT)
- ・「富岳」での高速計算
- ・実験室宇宙物理学への応用
- ・計測インフォマティクス以外の学際展開
- ・まとめと展望

(略歴)

1993年 東京大学工学部物理工学科卒業

2023年より 現職

(現在の専門分野)

データ駆動科学、計算物質物理学、
プラズマ科学、数理科学

(主な委員会活動)

・ 日本学術振興会 産学連携課

R026先端計測技術の将来設計委員会(委員)

背景：4つのインフォマティクス

歴史的経緯：「マテリアルインフォマティクス」から「4つのインフォマティクス」に発展.

(狭義の)マテリアル インフォマティクス

ナニを作れば良いか？
仕様, **what**の問い

プロセス インフォマティクス

ドウ作れば良いか？ **how**の問い.
製造プロセス最適化, プラント制御など

計測 インフォマティクス

情報抽出
「ミエナイ」モノを「ミル」

クライオ電子顕微鏡
(2017年ノーベル賞)

物理 インフォマティクス

whyの問い.

背景: 計測データ解析におけるベイズ推定

- ・ **ベイズ推定 = 人間の推定を模した, AI型の数理手法**
- ・ 計測データ $Y \equiv (Y_1, \dots, Y_m)$ が与えられた時に,
目的状態量(知りたい量) $X \equiv (X_1, \dots, X_n)$ の確率分布 (ベイズ事後確率分布) を,
ベイズの定理 (下記) に基づいて得る

$$P(X|Y) = \frac{P(Y|X)P(X)}{P(Y)}$$

- ・ 例: 病気Aには検査Bがあるが, 誤判定する場合もある.

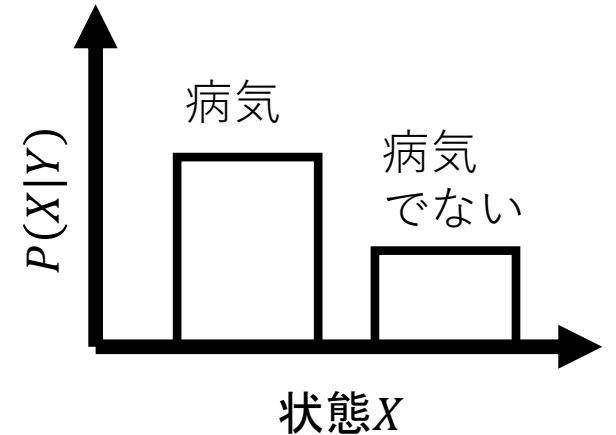
「病気Aにかかっているか, 否か」

検査Bを3回行ったところ, 3回とも陽性と診断された.

実際に, 病気Aにかかっている確率は, 何パーセントか?

知りたい情報 X

計測データ Y



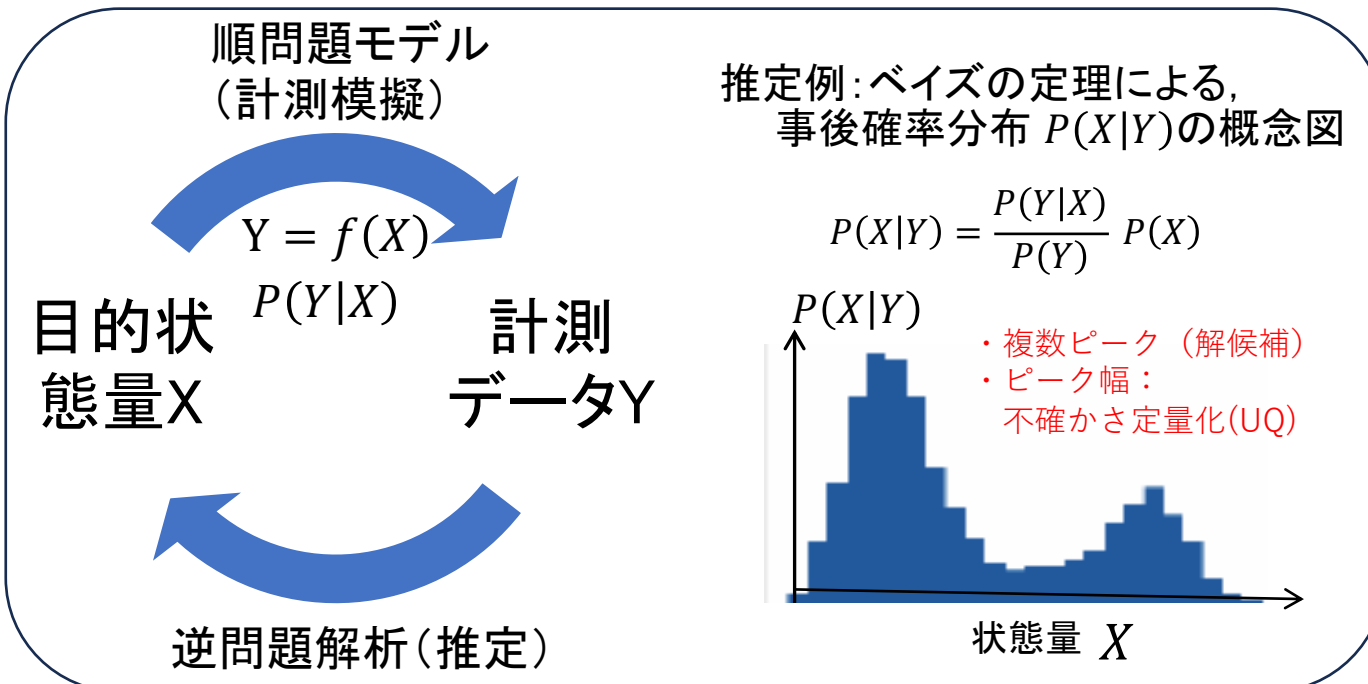
汎用データ解析(逆問題解析)フレームワークODAT-SE(旧称2DMAT)

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>; Motoyama, *et al.*, Comp. Phys. Commun. 280, 108465 (2022)

- ・データ駆動科学の立場から開発された, 新しいデータ解析フレームワーク
- ・PCからスパコン(「富岳」など)を想定して,
高速・高信頼な逆問題型データ解析フレームワーク
- ・順問題モデルを入れ替えることで, 様々な計測に適用可.

ODAT-SE
=Open Data Analysis Tool
for Science and Engineering

逆問題解析の概念図



- ・ 5種解析法が実装
 - (1) 局所探索型最適化(Nelder-Mead法)
 - (2) グリッド型探索
 - (3) 並列化ベイズ最適化
 - (4) レプリカ交換(RE)モンテカルロ(MC)法
 - (5) ポピュレーションアニーリング(PA)モンテカルロ(MC)法**
- 「富岳」などの超並列計算機に最適

汎用データ解析(逆問題解析)フレームワークODAT-SE(旧称2DMAT)

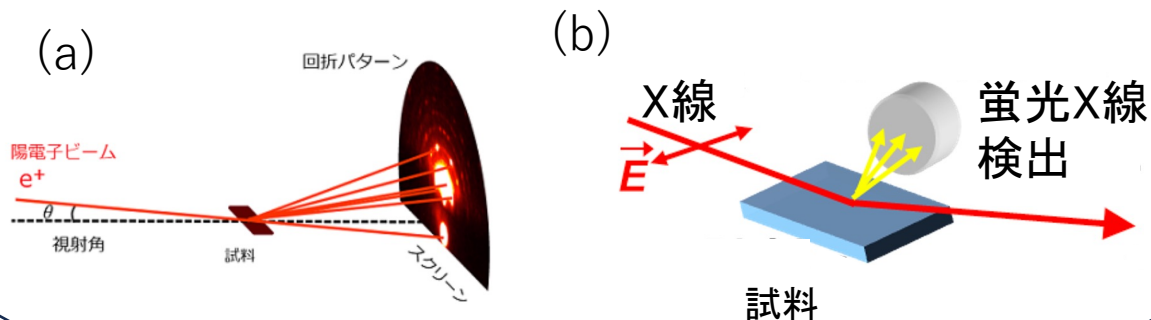
物質科学での活用

ユーザー例:

KEK物構研, 東大物性研, 北大触媒研,
原研, 早稲田大, 分子研, など

実験:

- ・ 全反射高速陽電子回折(KEK)(a),
反射高速電子回折(多数研究施設)
- ・ 低速陽電子回折(KEK), 低速電子回折(多数施設),
- ・ 表面X線回折(多数施設)
- ・ オペランド偏光全反射蛍光-X線吸収微細構造
(PTRF-XAFS, 北大触媒研)(b)



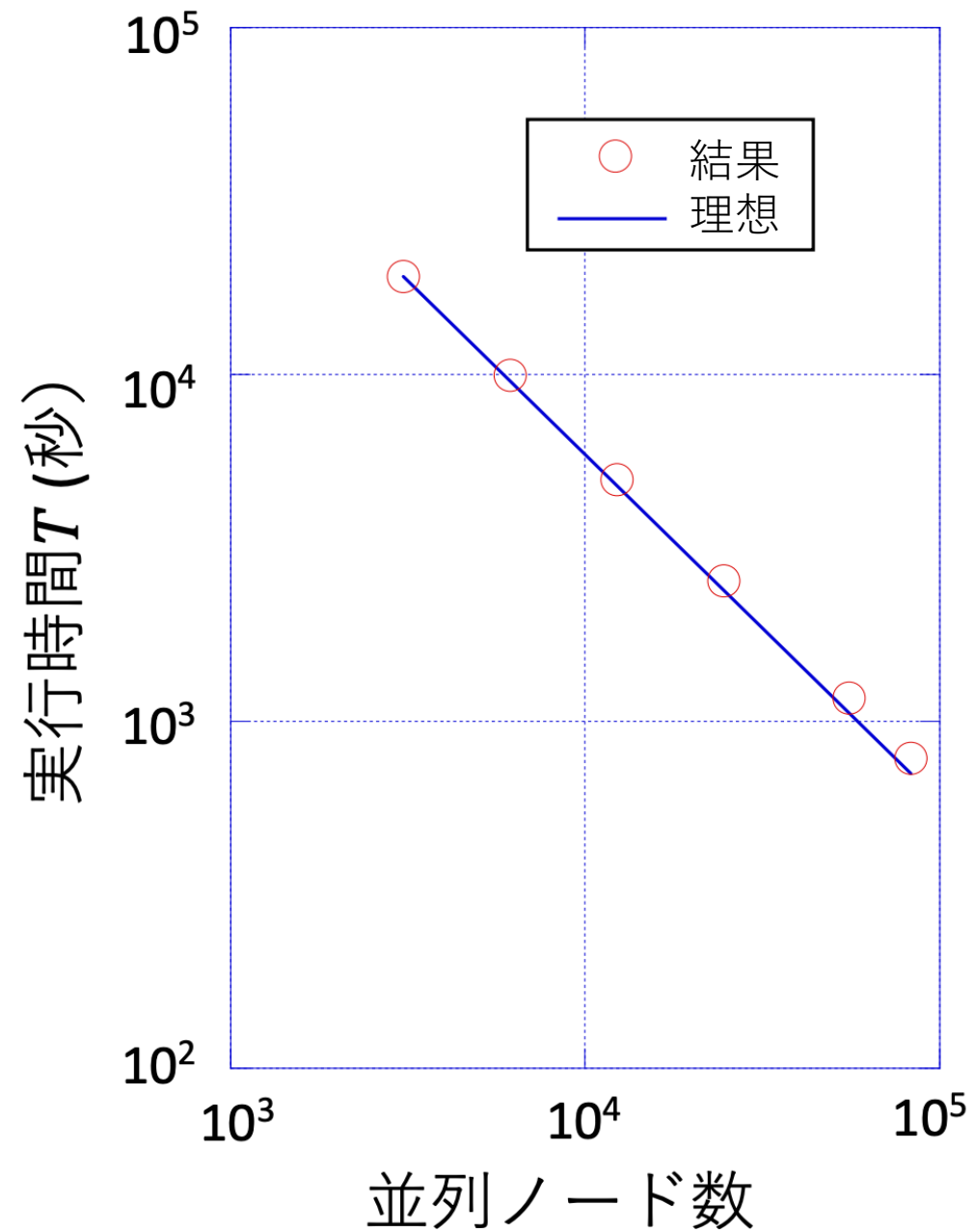
プラズマ科学での活用(2023年～)

プラ核学会(2024年11月)での発表

- ・ **小林達哉**
(NIFS 位相空間乱流ユニット) 他
「荷電交換分光計測を用いた
位相空間揺らぎのベイズ推定」
- ・ **金史良**(京大) 他
「電子サイクロトロン放射計測への
ベイズ推定の適用」

「富岳」での高速計算

- 「富岳」で、ポピュレーションアニーリング法をコード調整中
- 並列ベンチマーク例
(計算ノード数)=3,072- 82,944(全体の約1/2)で,
強スケーリング型並列効率 $\alpha=0.9$ (理想 $\alpha=1$)



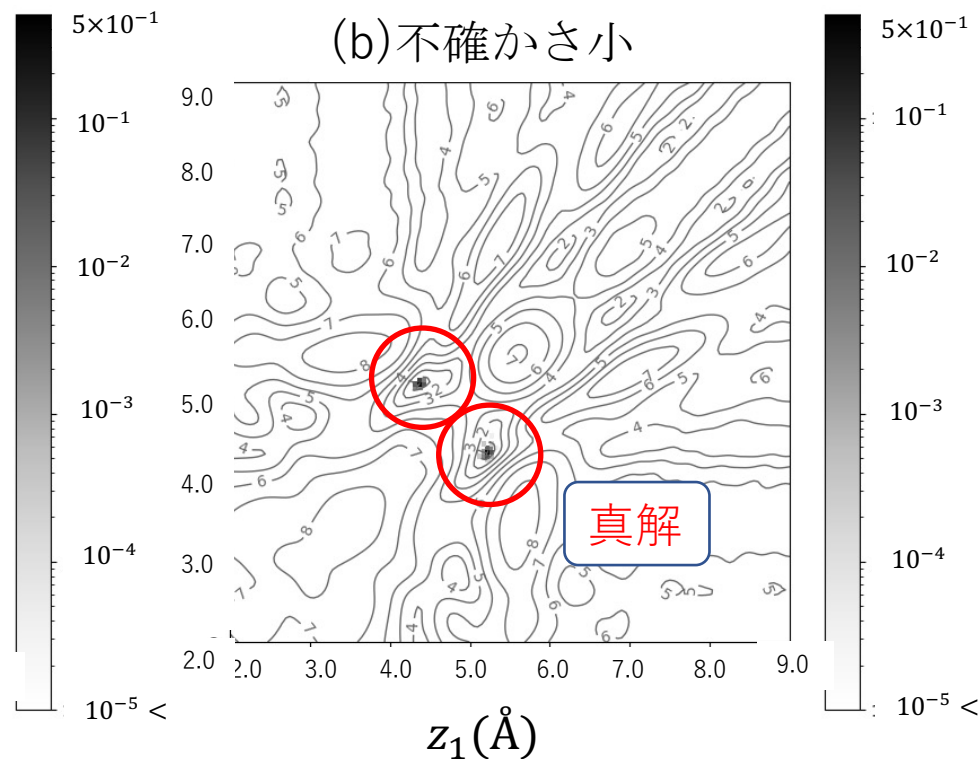
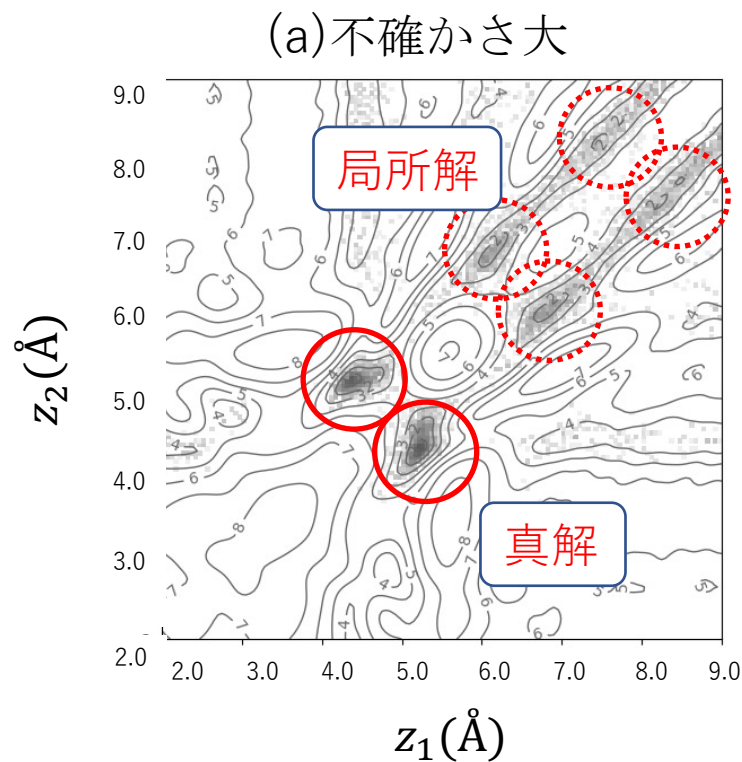
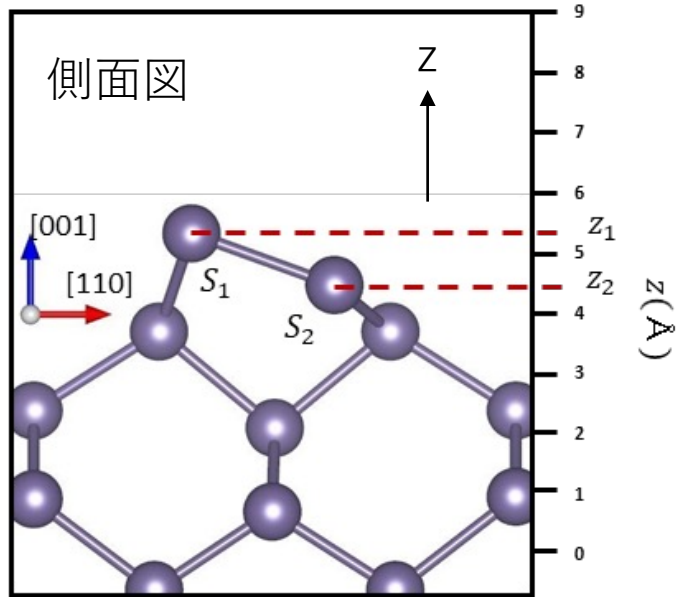
ベイズ事後確率分布のデモ

2変数での分布 $P(z_1, z_2|Y)$ プロット (不確かさ:(a)大, (b)小)

大域探索

→真解・局所解の検出

問題:陽電子回折による
半導体Ge表面原子座標 (z_1, z_2)



注: 実測定データの代わりに, 人工データを利用

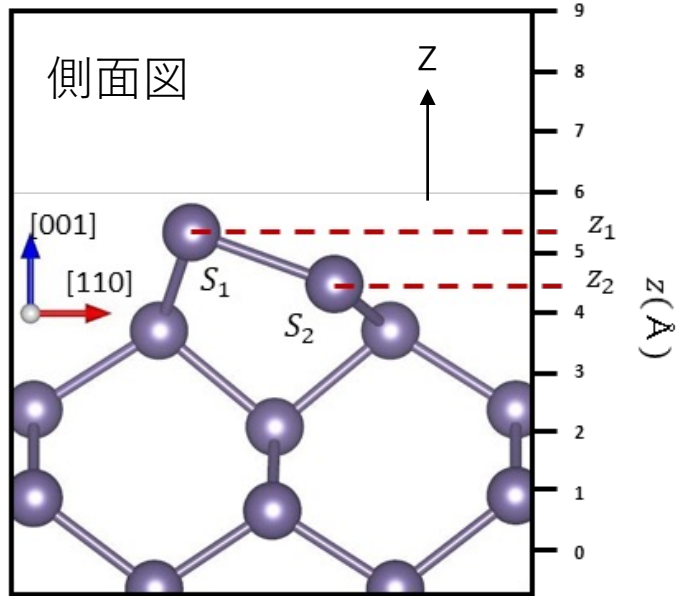
ベイズ事後確率分布のデモ

2変数での分布 $P(z_1, z_2 | Y)$ のアニメーション(不確かさ: 大→小)

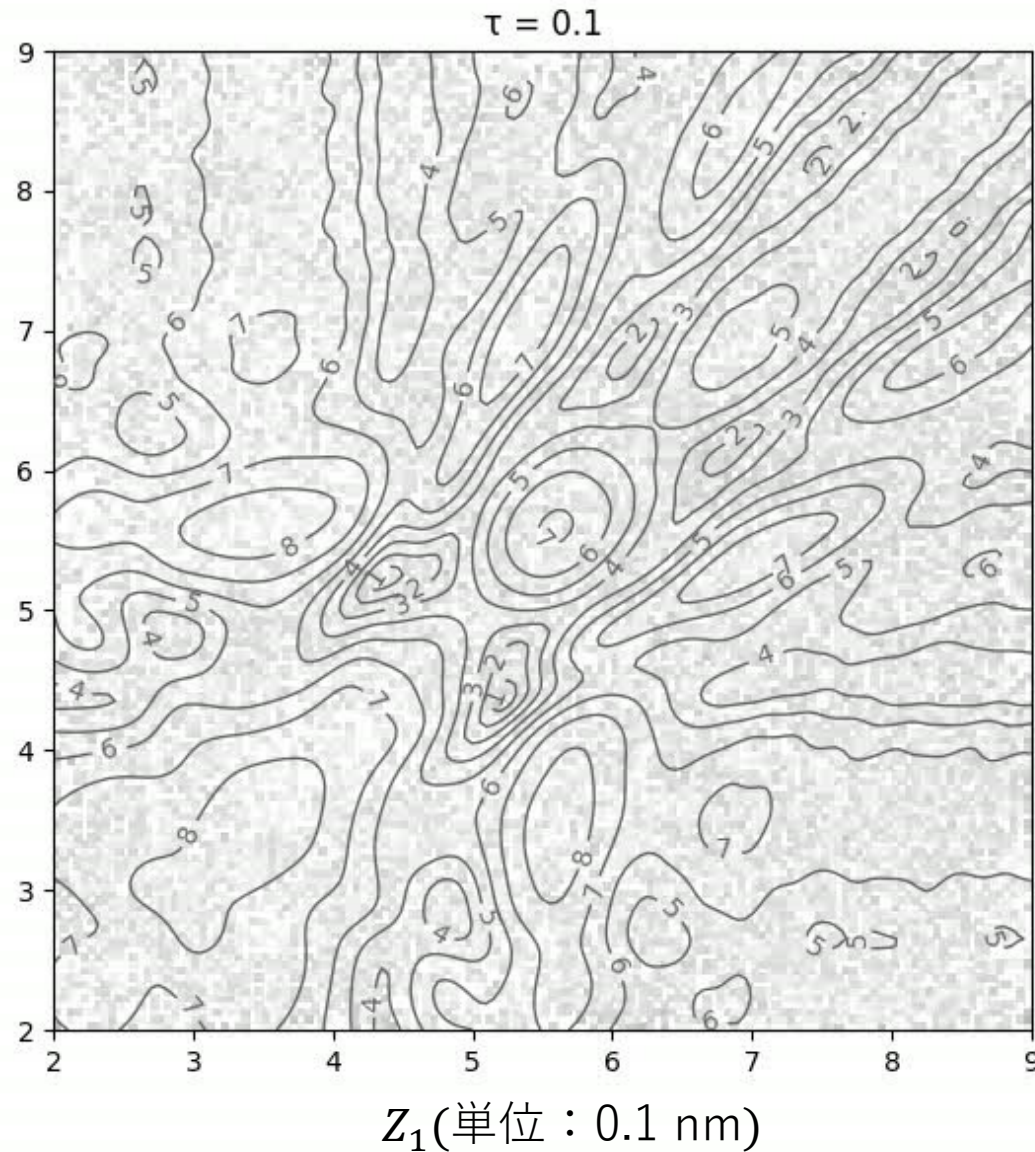
大域探索

→ 真解・局所解の検出

問題: 陽電子回折による
半導体Ge表面原子座標 (z_1, z_2)



Z_2 (単位: 0.1 nm)



実験室宇宙物理学への応用：非平衡プラズマ解析

プラズマ核融合学会年会, 2024年11月(招待講演)

星健夫(1), 中野陽斗(1,2), 境健太郎(1)、Lan Gao・Hantao Ji(4),

(1)NIFSプラズマ量子プロセスユニット, (2)総研大, (3) Princeton Plasma Physics Laboratory

動機: 宇宙線(宇宙空間に存在する高エネルギープラズマ粒子)の起源

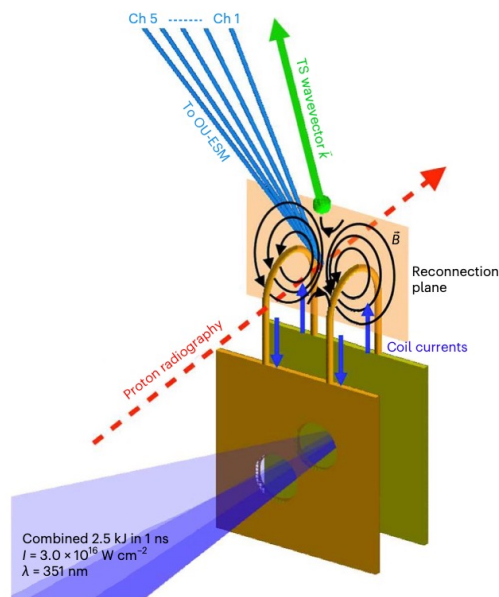
実験: 高出力レーザーをコイルターゲットに照射して発生する磁気リコネクション[1,2]の物理量の測定.

協同トムソン散乱(CTS)スペクトルを計測.

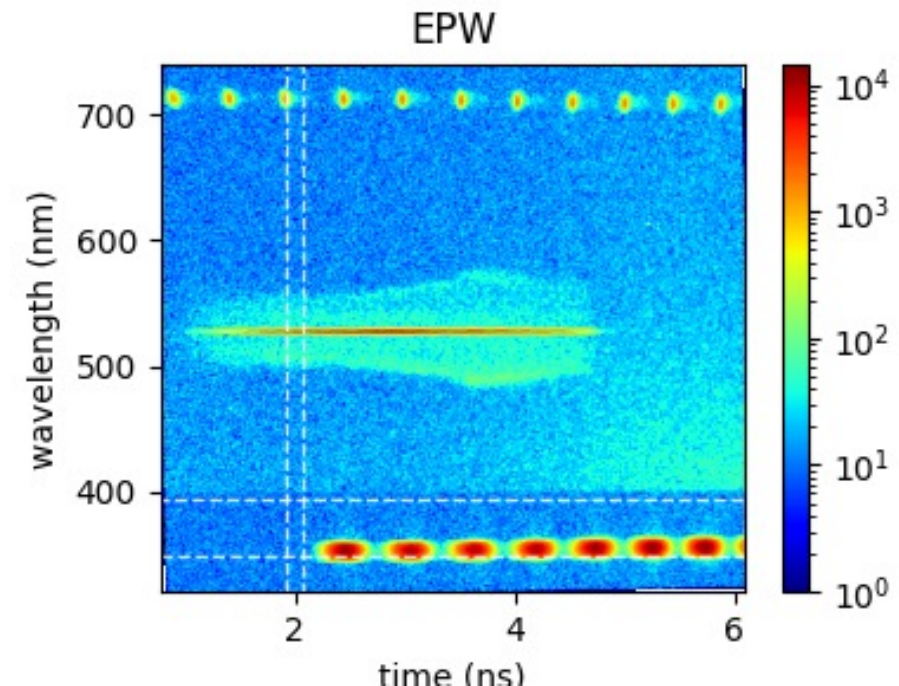
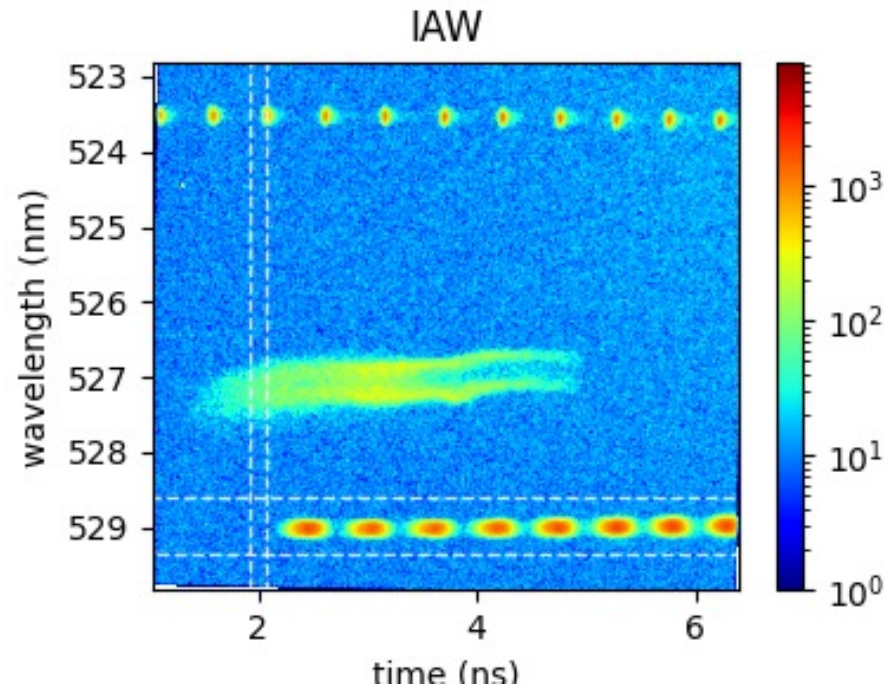
イオン音波 (IAW)と電子プラズマ波 (EPW)と共鳴した信号が得られる[2].

[1] Zhang, *et al.*, Nature Physics 19, 909 (2023). [2] Ji, *et al.*, Phys. Plasmas 31, 102112 (2024)

実験系模式図



(以下では, $t=2.9\text{ns}$ のデータを抽出)



関連：物理学会シンポジウム

「先端計測のフロンティア～見えないモノを見る挑戦」

2024年9月開催。

運営：領域2(プラズマ, 主運営領域), 領域5(光物性), 領域9(表面・界面、結晶成長), 領域10(構造物性(誘電体、格子欠陥・ナノ構造、X線・粒子線、フォノン)).

1. 田中慎一郎(阪大産研)はじめに
2. 出村雅彦(NIMS)マテリアル研究のためのデータ基盤の構築
3. 勝川行雄(国立天文台)太陽天体プラズマの多波長リモートセンシング技術
4. **小林達哉(NIFS位相空間乱流ユニット)** 定量的プラズマ乱流計測のための計測器連携
5. 和田健(KEK物構研)陽電子回折とデータ駆動科学が拓く表面原子配列解明の新境地
6. 松井文彦(分子研)光電子運動量顕微鏡による電子状態研究:ミルからワカルへ
7. 藤岡慎介(阪大レーザー研)
レーザーで生成される非定常・非平衡・微小プラズマの高速高空間分解診断
8. **星健夫(NIFS)** まとめと展望

計測インフォマティクス以外の学際展開

・マテリアルインフォマティクス

2024年11月プラ核学会シンポジウム

「多重ビーム照射施設とマテリアルインフォマティクスの連携による核融合炉材料開発研究の加速」

長坂琢也、田中照也(NIFS超高流束協奏材料ユニット)、
近田拓未(静岡大)、原嶋庸介(奈良先端大)、星健夫

・数理科学

2024年度NIFS一般共同研究(NIFS24KIIQ003)

代表: 曾我部知広(名古屋大学), 所内世話人: 星健夫

→(発展)(2025年度-)科研費基盤S

「超大規模行列関数計算法の確立」(代表: 曾我部知広、分担者: 星健夫など)

(数理科学+素粒子物理学+核融合科学+物性物理学+固体地球科学+量子情報科学)

参考: 研究会「数理科学・プラズマ科学・原子分子科学・物質科学の共通研究拠点形成」

2025年6月16-17日、NIFS/ハイブリッド, <https://sites.google.com/view/nifs-ws2025/>

NIFSからの講演者: 彌富豪(可知化センシングユニット)、
加藤太治・境健太郎(プラズマ量子プロセスユニット)

まとめと展望

- ・ まとめ(1) 計測インフォマティクスによる学際展開
 - ・ 「富岳」を利用した高速・高信頼ベイズ推定
 - ・ 物質科学・プラズマ科学への応用
- ・ まとめ(2) 計測インフォマティクス以外による学際展開
 - ・ マテリアルインフォマティクス(炉材料)
 - ・ 数理学(大規模行列関数;応用:素粒子、核融合、物性物理、固体地球科学、量子情報科学)
- ・ 展望(1) データ駆動科学(インフォマティクス)・数理学をキーワードとして、さらなるユニット間連携・学際展開の拡大、産業展開。
- ・ 展望(2) ムーンショット目標10プロジェクトの開始(2024年11月～)
「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」
プロジェクトマネージャー:星健夫、<https://ms10ds.nifs.ac.jp/>

謝辞 本スライドに名前があるNIFSメンバー:

- ・ 小林達哉(位相空間乱流ユニット)
- ・ 長坂琢也、田中照也(超高流束協奏材料ユニット)
- ・ 彌富豪(可知化センシングユニット)
- ・ 加藤太治(プラズマ量子プロセスユニット)