

非線型科学コロキウム

Nonlinear Science Colloquium

講演者：星健夫/自然科学研究機構 核融合科学研究所 教授

Takeo Hoshi/ National Institutes of Natural Sciences

National Institute for Fusion Science

講演題目：ベイズ推定と富岳をもちいた先端計測インフォマティクス

日時：2025年12月18日（木）17:00-18:30

場所：早稲田大学西早稲田キャンパス

55号館N棟1階第2会議室

先端計測手法のデータ解析は計測インフォマティクスと呼ばれ、クライオ電子顕微鏡（2017年ノーベル賞）など、情報技術の発展と共に飛躍を遂げている。我々は、計測インフォマティクス向けデータ解析フレームワークODAT-SE（オーダットエスイー；Open Data-Analysis Tool for Science and Engineering；2024年までの旧称は2DMAT）[1,2]を開発している。ODAT-SEは、スーパーコンピュータ（並列計算機）を前提とした汎用逆問題解析フレームワークとして開発され、並列化ベイズ最適化法（PHYSBO）、並列化ベイズ推定（モンテカルロ）法、グリッド探索などが実装されている。特に、10万以上の並列化自由度をもつ、Population Annealing Monte Carlo法(PAMC法)は、「富岳」の約半分を使った大規模計算で、高い並列効率（強スケール型並列効率 $\alpha=0.9$ ）を示している。ODAT-SEはもともと、KEK 物構研における革新的2次元物質構造解析実験である、全反射高速陽電子回折（TRHEPD、トレプト）（最近の応用論文[3]）などを対象として開発された。その後、学際展開として、物質科学のみならず、核融合分野などのプラズマ科学にも対象がひろがっている。

これら学際展開の発展として、2024年10月からはムーンショット目標10（フュージョンエネルギー）でのプロジェクトが発足し、筆者はプロジェクトマネージャーを勤めている[4]。HPCやAI/データ駆動科学を「横糸」として、プラズマ科学・物質科学にまたがる研究拠点を目指している。

文献

[1] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/odat-se/>

[2] Y. Motoyama, et al., Comp. Phys. Communi. 280, 108465 (2022).

[3] Y. Sato, et al., Phys. Rev. Mater. 9, 014002 (2025)

[4] <https://ms10ds.nifs.ac.jp/>

非線型科学コロキウム

早稲田大学理工学術院

先進理工学部応用物理学科

組織委員：山崎 義弘 原山 卓久

小澤 徹

連絡先：小澤 徹 研究室

早稲田大学理工学術院

西早稲田キャンパス

55号館N-310

03-5286-8487 / 内線 73-3564

txozawa@waseda.jp