

計算と計測データの連携

星 健夫(核融合科学研究所)

1. 計測データ解析フレームワーク2DMAT
2. 計算と計測データの連携にむけて(I) NIFS内の議論
(マイクロ集団現象観測プロジェクト(MCPoP)準備室)
3. 計算と計測データの連携にむけて(II)
ムーンショット目標10
「デジタルシステム」プロジェクト(*)での議論

(*)正式名称:ムーンショット目標10(MS10)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」

PM:星健夫

参考:PMアドバイザー

- ・福山淳(京都大学 名誉教授)
- ・高部英明(大阪大学 名誉教授)
- ・武田晴夫(内閣府人間中心のAI社会原則会議構成員、
内閣官房Trusted Web推進協議会構成員、
核融合エネルギーフォーラム運営委員、日立製作所 科学技術顧問)

(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、数理科学

(現在の主な兼業)

・高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

・東京大学 物性研究所

(現在の主な委員会活動)

・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)

計算と計測データの連携

星 健夫(核融合科学研究所)

1. 計測データ解析フレームワーク2DMAT
2. 計算と計測データの連携にむけて(I) NIFS内の議論
(マイクロ集団現象観測プロジェクト(MCPOp)準備室)
3. 計算と計測データの連携にむけて(II)
ムーンショット目標10
「デジタルシステム」プロジェクト(*)での議論

(*)正式名称:ムーンショット目標10(MS10)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」

PM:星健夫

参考:PMアドバイザー

- ・福山淳(京都大学 名誉教授)
- ・高部英明(大阪大学 名誉教授)
- ・武田晴夫(内閣府人間中心のAI社会原則会議構成員、
内閣官房Trusted Web推進協議会構成員、
核融合エネルギーフォーラム運営委員、日立製作所 科学技術顧問)

(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、数理科学

(現在の主な兼業)

・高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

・東京大学 物性研究所

(現在の主な委員会活動)

・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

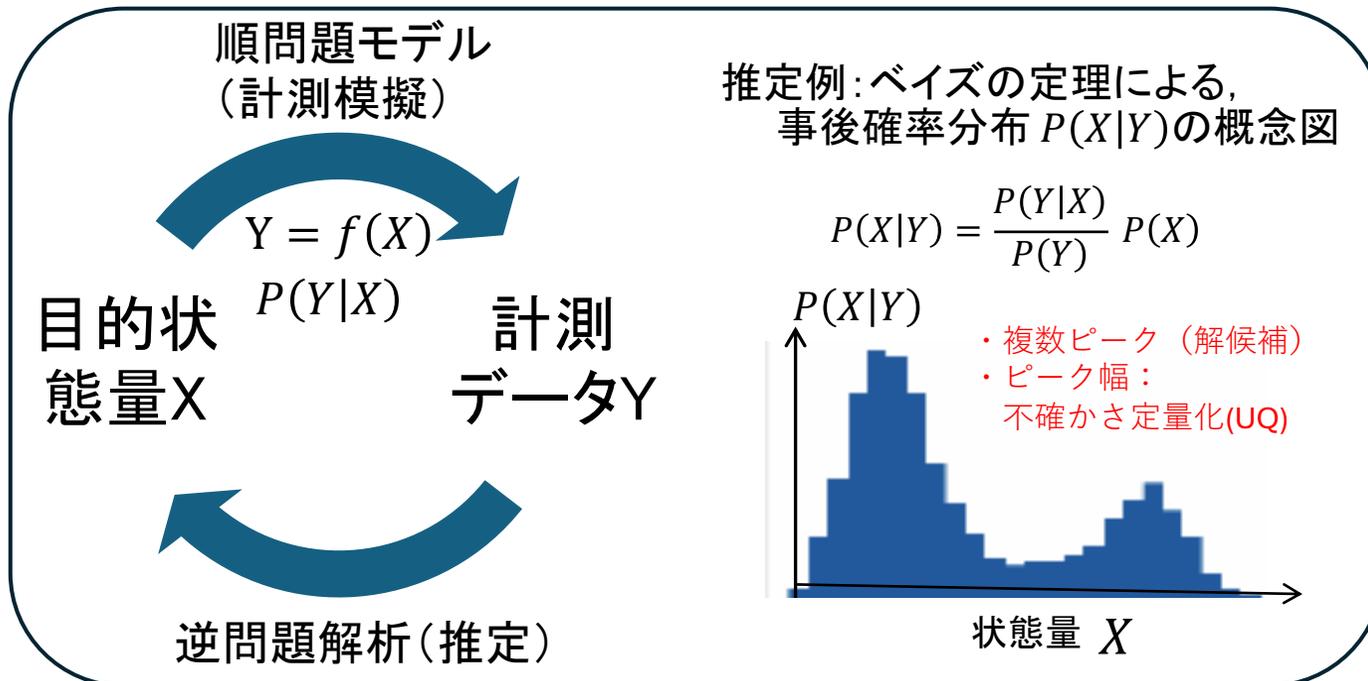
演繹的理解。
whyの問い。

計測データ解析(逆問題解析)フレームワーク2DMAT

<https://github.com/issp-center-dev/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.

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

計測データ解析(逆問題解析)フレームワーク2DMAT

物質科学での活用

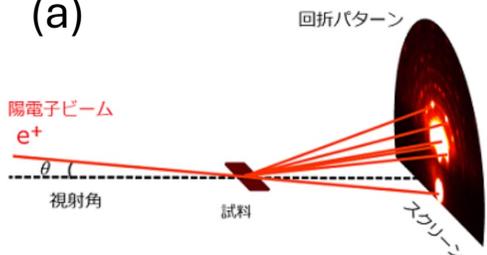
ユーザー例:

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

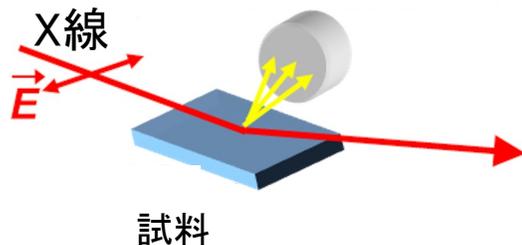
実験:

- ・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)

(a)



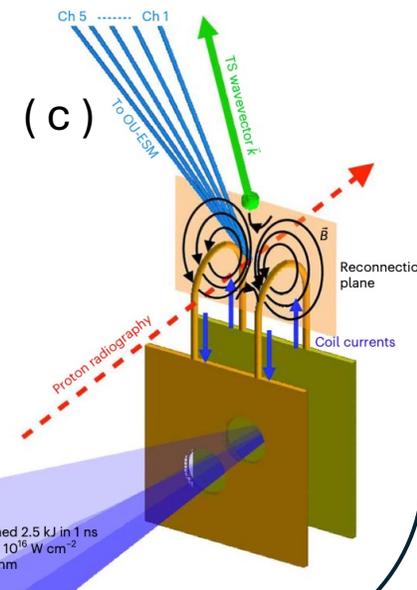
(b)



プラズマ科学での活用(2023年~)

プラ核学会での発表

- ・星(NIFS)他
「富岳による高次元ベイズ推定と
実験室宇宙物理学への応用」(招待講演)(c)
(主な共同研究者: Lan Gao,
Hantao Ji (PPPL), 境健太郎(NIFS))
- ・小林達哉(NIFS)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」



Combined 2.5 kJ in 1 ns
 $I = 3.0 \times 10^{16} \text{ W cm}^{-2}$
 $\lambda = 351 \text{ nm}$

計算と計測データの連携

星 健夫(核融合科学研究所)

1. 計測データ解析フレームワーク2DMAT
2. 計算と計測データの連携にむけて(I) NIFS内の議論
(マイクロ集団現象観測プロジェクト(MCPoP)準備室)
3. 計算と計測データの連携にむけて(II)
ムーンショット目標10
「デジタルシステム」プロジェクト(*)での議論

(*)正式名称:ムーンショット目標10(MS10)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」

PM:星健夫

参考:PMアドバイザー

- ・福山淳(京都大学 名誉教授)
- ・高部英明(大阪大学 名誉教授)
- ・武田晴夫(内閣府人間中心のAI社会原則会議構成員、
内閣官房Trusted Web推進協議会構成員、
核融合エネルギーフォーラム運営委員、日立製作所 科学技術顧問)

(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、数理科学

(現在の主な兼業)

・高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

・東京大学 物性研究所

(現在の主な委員会活動)

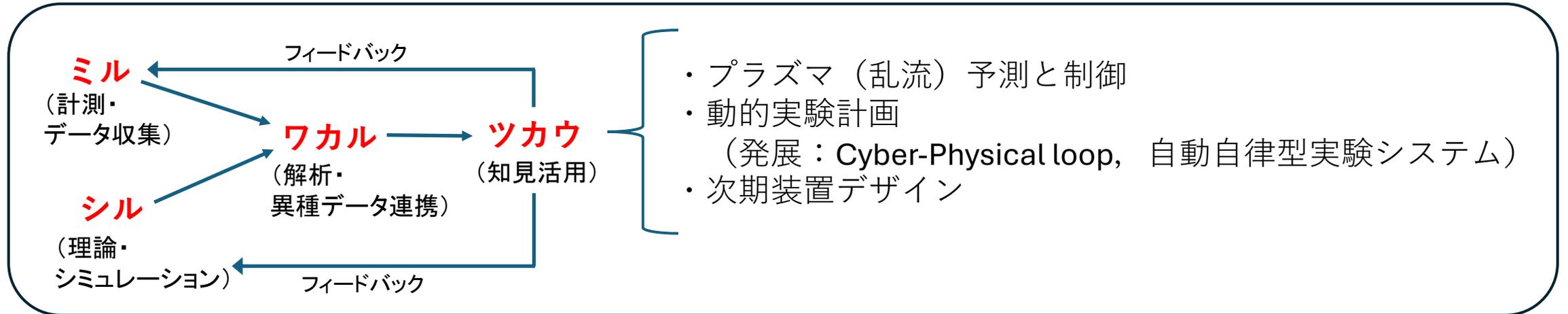
・日本学術振興会 産学連携課

R026先端計測技術の将来設計委員会(委員)

「実験と連携した理論・シミュレーション研究」のワークフロー

星健夫

ワークフロー



オープンサイエンス

- ・ ソフトウェア・データの共有（デジタルプラットフォーム）
- ・ 学際展開（MCPOP以外，核融合分野以外）

参考：マテリアルインフォマティクスの発展

特集：X-インフォマティクス：
データ駆動材料研究の進展～NIMSにおける実践を例として～
出村雅彦，情報の科学と技術，2021年71巻6号 p. 252-257
https://doi.org/10.18919/jkg.71.6_252

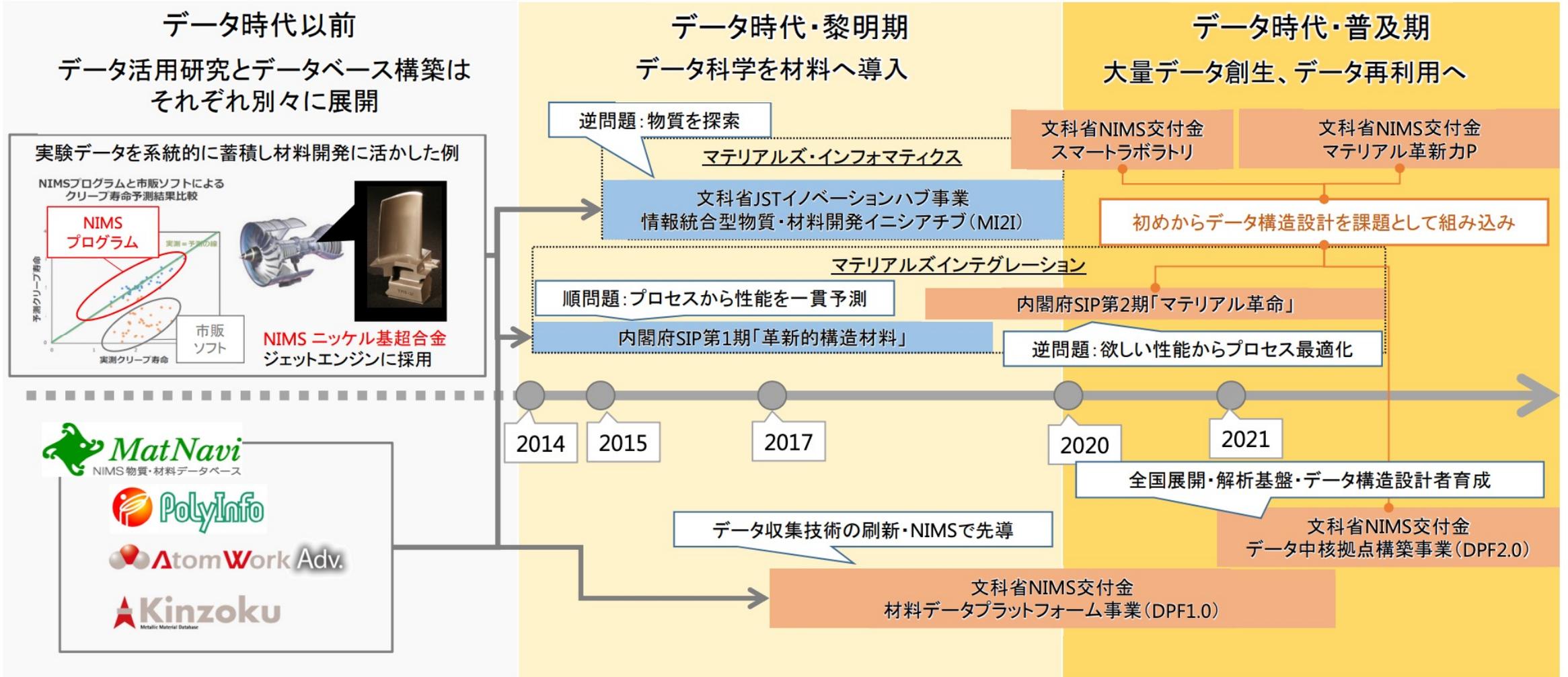


図2 材料分野におけるデータ駆動研究・データ基盤構築の系譜

計算と計測データの連携

星 健夫(核融合科学研究所)

1. 計測データ解析フレームワーク2DMAT
2. 計算と計測データの連携にむけて(I) NIFS内の議論
(マイクロ集団現象観測プロジェクト(MCPOp)準備室)
3. 計算と計測データの連携にむけて(II)
ムーンショット目標10
「デジタルシステム」プロジェクト(*)での議論

(*)正式名称:ムーンショット目標10(MS10)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」

PM:星健夫

参考:PMアドバイザー

- ・福山淳(京都大学 名誉教授)
- ・高部英明(大阪大学 名誉教授)
- ・武田晴夫(内閣府人間中心のAI社会原則会議構成員、
内閣官房Trusted Web推進協議会構成員、
核融合エネルギーフォーラム運営委員、日立製作所 科学技術顧問)

(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、数理科学

(現在の主な兼業)

・高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

・東京大学 物性研究所

(現在の主な委員会活動)

・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)

**ムーンショット目標10：
2050年までに、フュージョンエネルギーの多面的な活用により、
地球環境と調和し、資源制約から解放された活力ある社会を実現
プログラムディレクター（PD）吉田 善章**

プロジェクト一覧（現状）

- ・革新的加速技術による大強度中性子源と先進フュージョンシステムの開発
プロジェクトマネージャー（PM）奥野広樹（理化学研究所）
- ・多様な革新的炉概念を実現する超伝導基盤技術
プロジェクトマネージャー（PM）木須隆暢（九州大学）
- ・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（PM）星健夫（NIFS）

参考：PMアドバイザー

- ・福山淳（京都大学 名誉教授）
- ・高部英明（大阪大学 名誉教授）
- ・武田晴夫（内閣府人間中心のAI社会原則会議構成員、
内閣官房Trusted Web推進協議会構成員、
核融合エネルギーフォーラム運営委員、日立製作所 科学技術顧問）

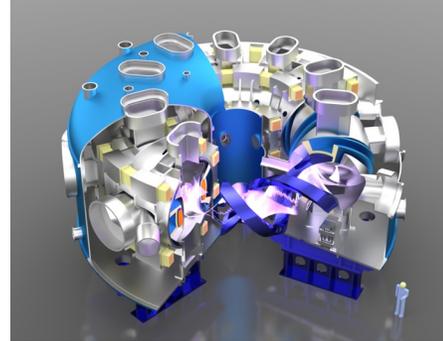
参考：ワークショップ（3月3日）

「フュージョンエネルギーにおけるバーチャルラボラトリとAI×データ戦略」
<https://indico.nifs.ac.jp/e/ms10ds-ws2025mar-1>

目指したい社会

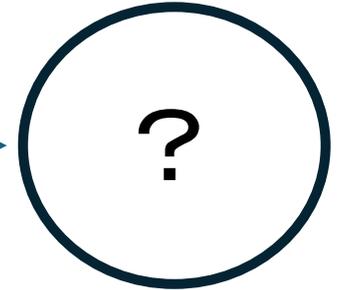
(1) フュージョンエネルギーシステムの設計や性能試験をデジタル空間で行える**バーチャルラボ**(仮想実験室、**Vラボ**)により、フュージョンエネルギーシステム開発が劇的に加速された社会。

既存装置(例)



© NIFS

次世代装置



Vラボ
(設計、性能評価、
試行錯誤)

(2) Vラボに汎用性を持たせることで、**多様な** フュージョンエネルギーシステムの研究開発が実現した社会。

Vラボへの 多様なニーズ

フュージョン
エネルギー
システムの例

磁場閉じ込め型

トカマク形式
ヘリカル形式
ミラー形式
磁場反転配位(FRC)形式

慣性型(レーザー型)

ミュオン触媒型

重要な
基盤技術
の例

中性子照射材料実験

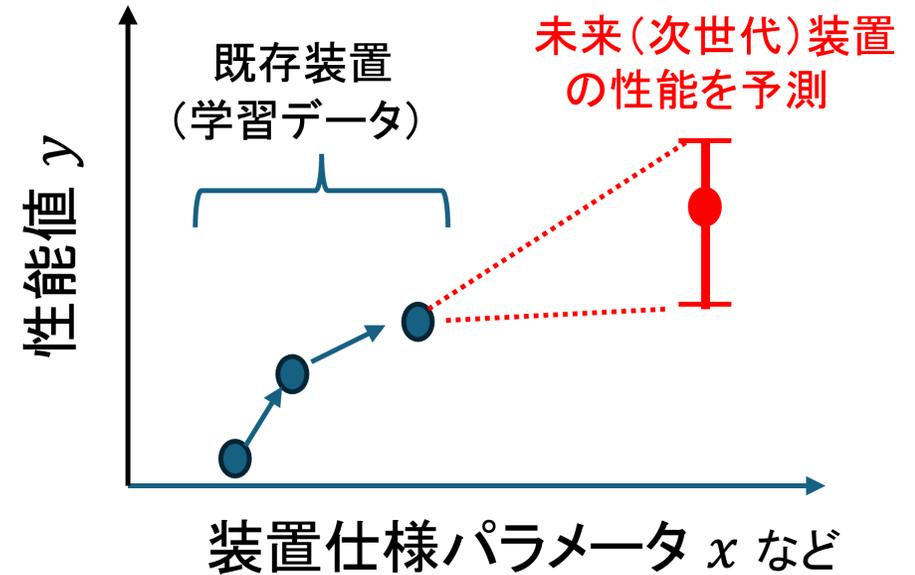
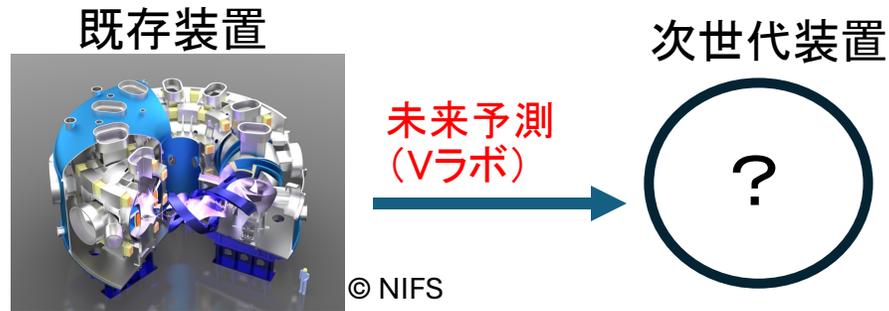
加速器技術(奥野PM)

超伝導材料開発(木須PM)

目指したい社会

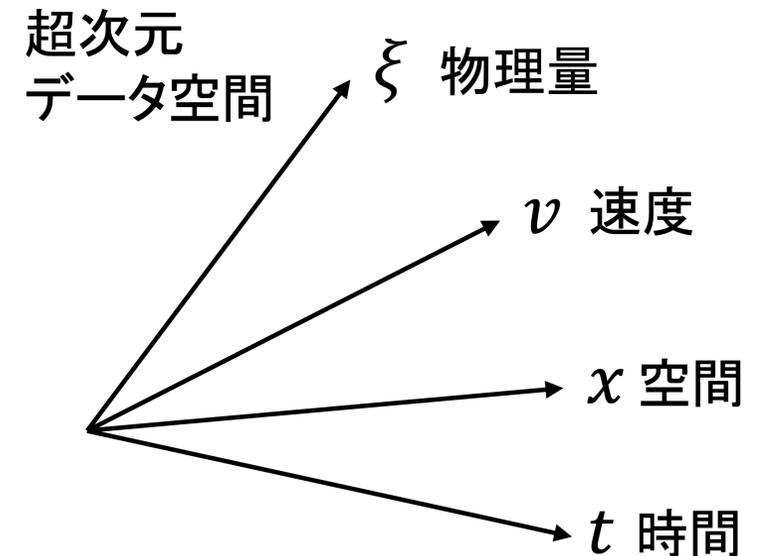
キーコンセプト(i) 未来予測技術

- ・既存装置のデータを学習データとし、未来(次世代)装置の性能を予測する。
- ・デジタル空間上での「試行錯誤」が可能になる。



キーコンセプト(ii) 超次元状態エンジニアリング

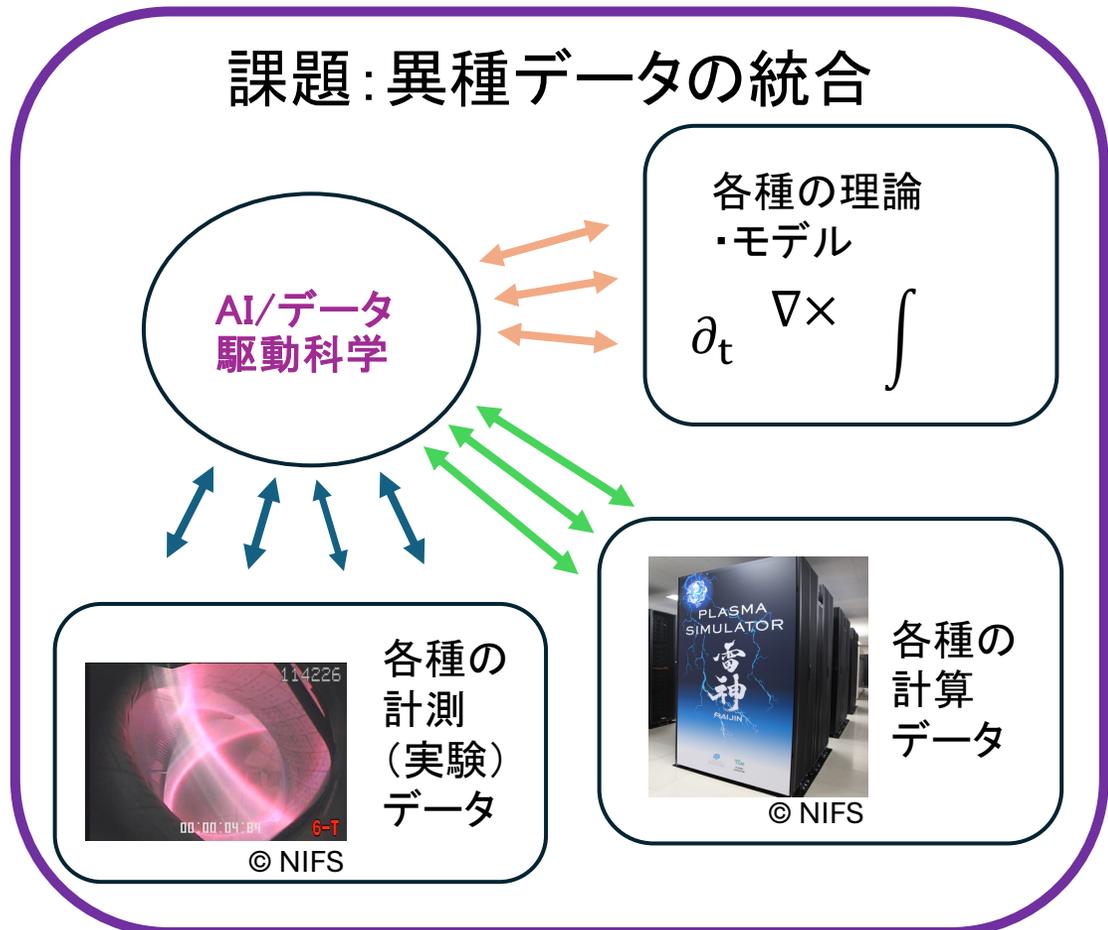
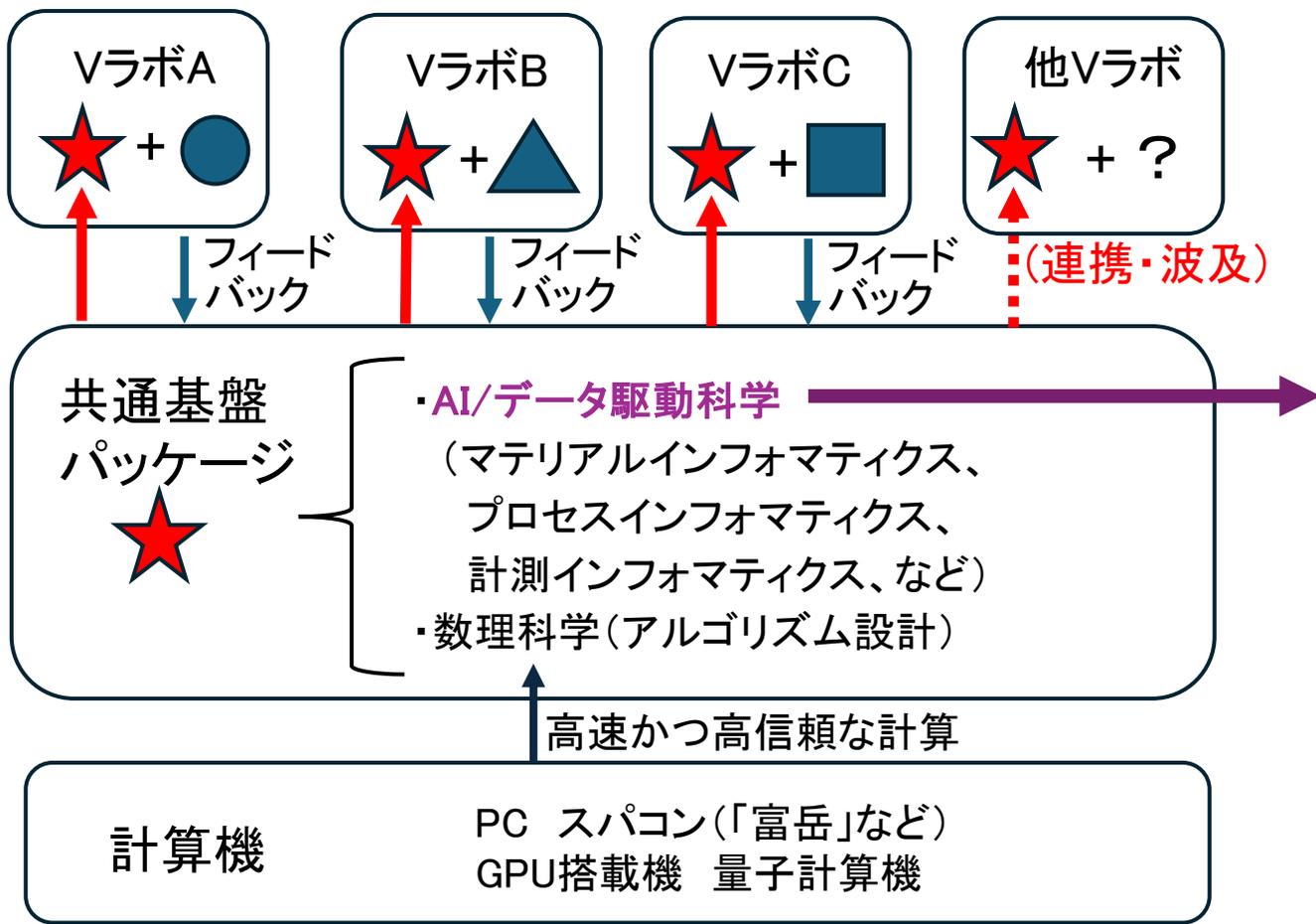
- ・超次元データ空間(時間軸・空間軸・速度軸・物理量軸などの異種座標軸からなるデータ空間)で、状態(プラズマなど)や装置の複雑性を表現し、工学応用に結びつける。



プロジェクト: 総論

3種バーチャルラボラトリ(Vラボ)を先行成功例として、社会実装する。

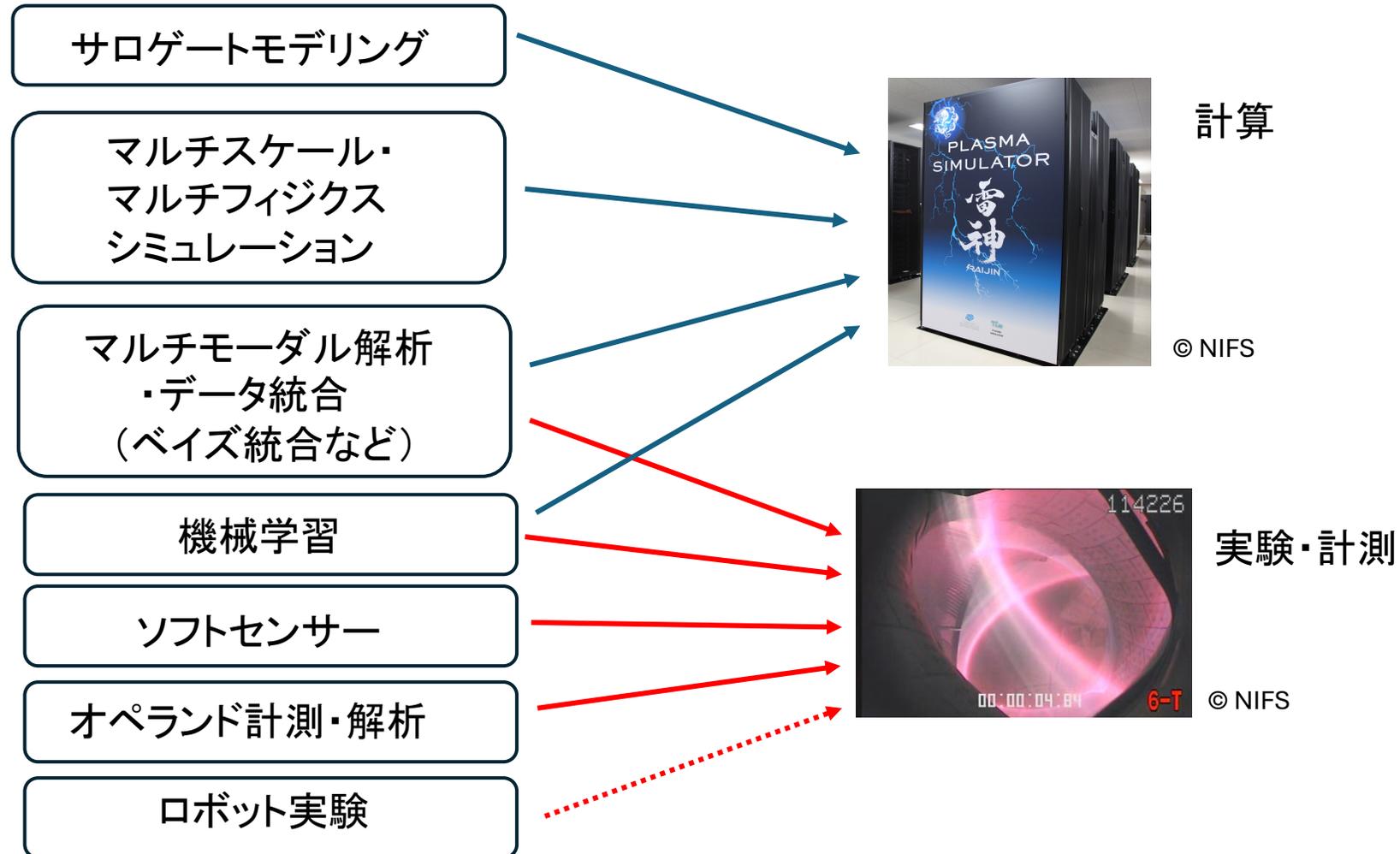
- ・ VラボA: 磁場閉じ込め型フュージョンエネルギーシステム
- ・ VラボB: 磁場閉じ込め型以外のフュージョンエネルギーシステム
- ・ VラボC: 中性子照射などの材料実験施設



プロジェクト:総論

要素技術の汎用性

例:半導体など, 先端製造プロセスで利用されるデータ駆動科学手法
→大半は、フュージョンエネルギー分野と共通

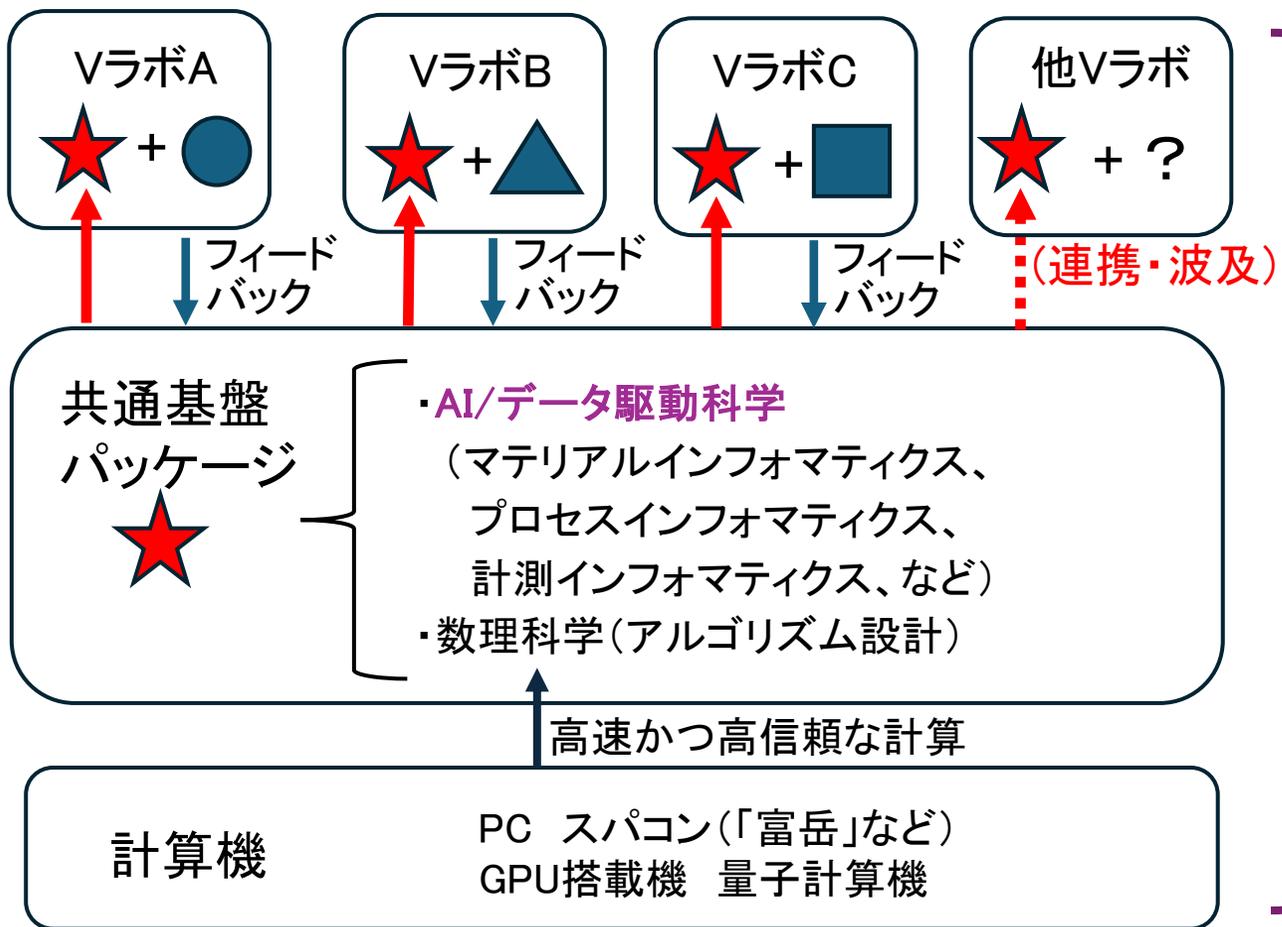


プロジェクト:総論

3種バーチャルラボラトリ(Vラボ)を先行成功例として、社会実装する。.....→波及:他のVラボ構築

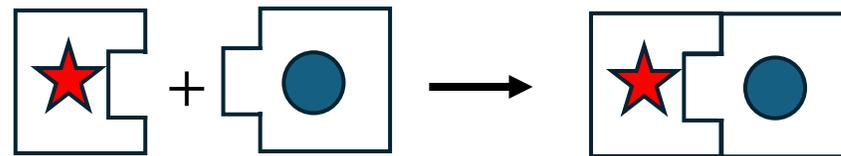
- ・ VラボA: 磁場閉じ込め型フュージョンエネルギーシステム
- ・ VラボB: 磁場閉じ込め型以外のフュージョンエネルギーシステム
- ・ VラボC: 中性子照射などの材料実験施設

(多様なフュージョン
エネルギーシステム、
他物理分野、産業界)



プログラム開発でのポイント

(1) モジュール(小規模プログラム)の組み合わせで、Vラボを構築



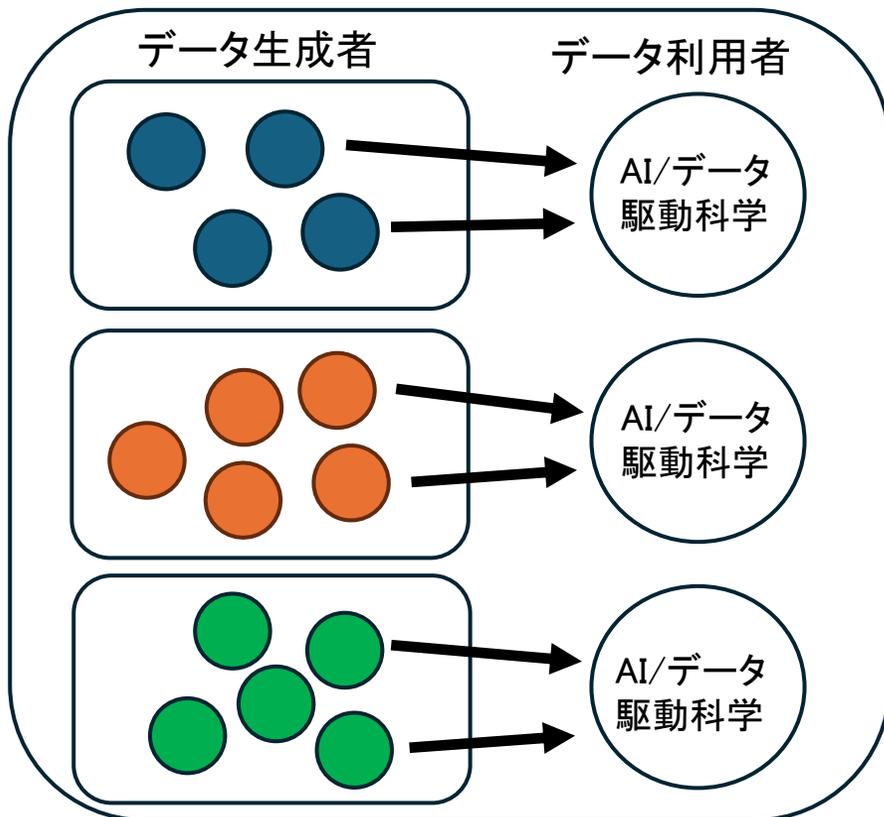
(2) 生成AI活用による開発体制
(コード作成、コードレビュー、文書化、
ユーザーサポート、コードテスト、など)

(3) 産業展開への方策
・ クラウドサービス化
・ 信頼性のあるデータ連携

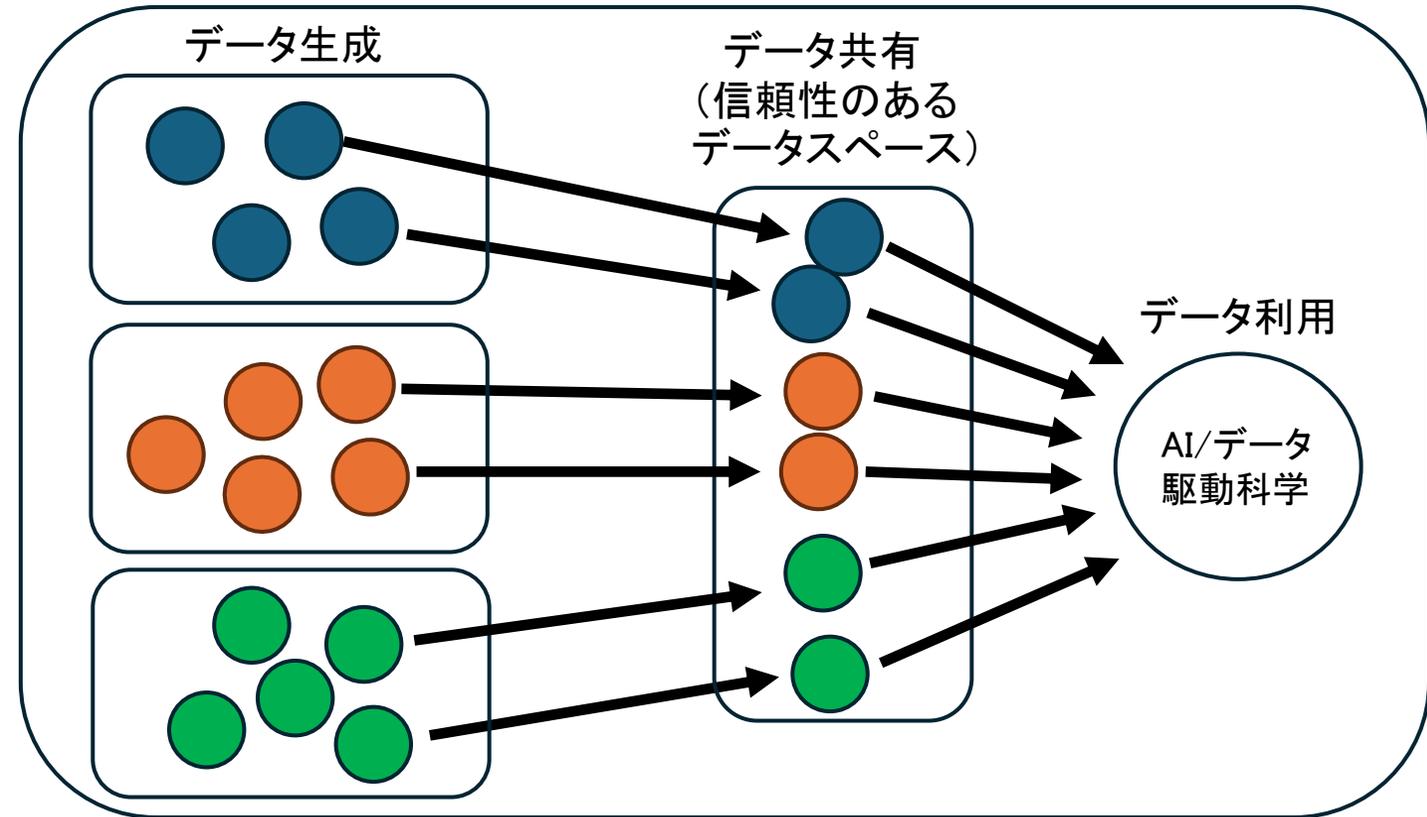
「AI×データ」戦略 ～データ生成・共有・活用の一貫的戦略～

- ・ Vラボは、多様なデータ(実験データ、計算データ、プログラムコード、文書など)から、構築される。
- ・ 現状: 研究所、企業、国家などが「壁」を作ってデータが分断されて、イノベーション・産業化に限界がある。
- ・ 「AI×データ」戦略 : 「信頼性のあるデータスペース」を通じた、データ生成・共有・利用を一貫的戦略。

現状: データ分断



「AI×データ」戦略

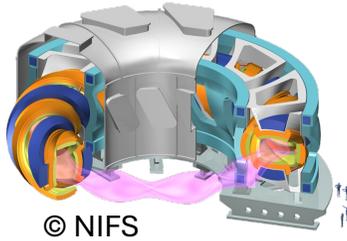


プロジェクト:バーチャルラボラトリ(Vラボ)各論

- ・ VラボA, B, Cそれぞれについて、未来予測むけのテーマは、多種多様。
→3月の連続ワークショップ(*)で個別に議論し、具体化。

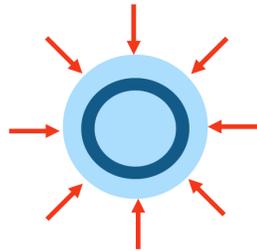
VラボA, B:フュージョンエネルギーシステム

磁場閉じ込め型



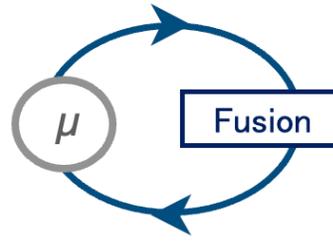
概念図例

慣性型
(レーザー型)



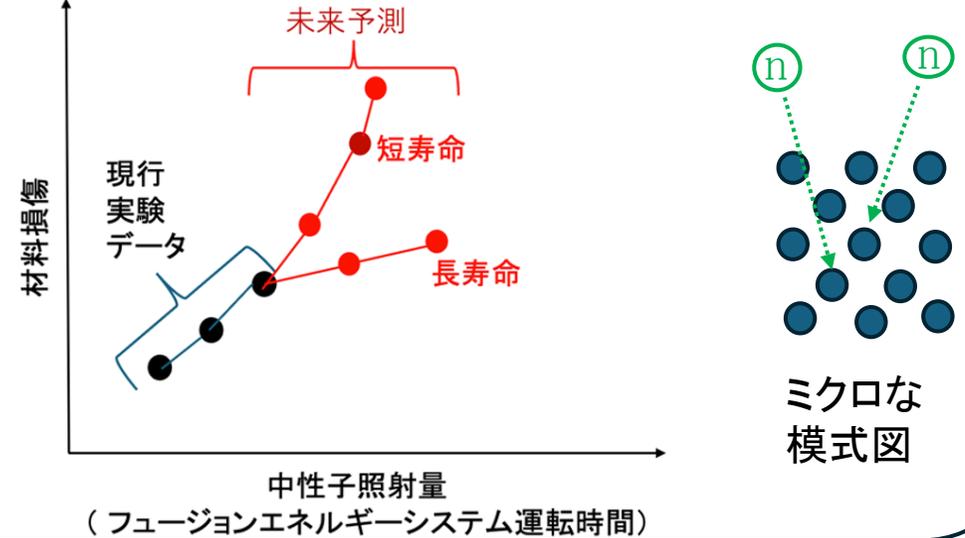
模式図

ミュオン触媒型



模式図

VラボC:中性子照射による材料損傷



→各Vラボのスケジュール:定量的目標を設定する。2027年度に初期バージョンを構築し、
2029, 2034年度に、それぞれの年度むけに設定した定量的目標の達成を目指す。

(*)連続ワークショップ「未来予測型バーチャルラボラトリによる多様なフュージョンエネルギーシステム(FES)開発」

総論と戦略
(3/3)

- VラボB (3/19)
- VラボA (3/24)
- VラボC (3/26)

- ・場所:東京(ハイブリッド開催)。第1回を除いて、講演募集あり。
- ・情報ページ(第1回) <https://indico.nifs.ac.jp/e/ms10ds-ws2025mar-1>
(第2-4回の情報もたどれる)

連続ワークショップ「未来予測型バーチャルラボラトリによる多様なフュージョンエネルギーシステム(FES)開発」

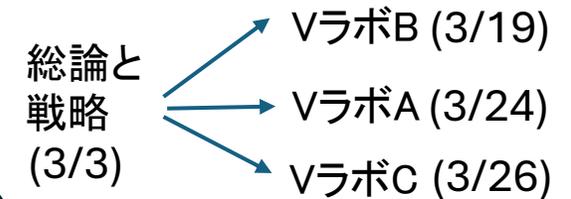
<https://indico.nifs.ac.jp/e/ms10ds-ws2025mar-1>

3月 3日 バーチャルラボラトリの概要と戦略

3月19日 磁場閉じ込め型以外のFESに関するバーチャルラボラトリ(VラボB)

3月24日 磁場閉じ込め型FESに関するバーチャルラボラトリ(VラボA)

3月26日 中性子照射材料実験と
マテリアルサイエンスに関するバーチャルラボラトリ(VラボC)

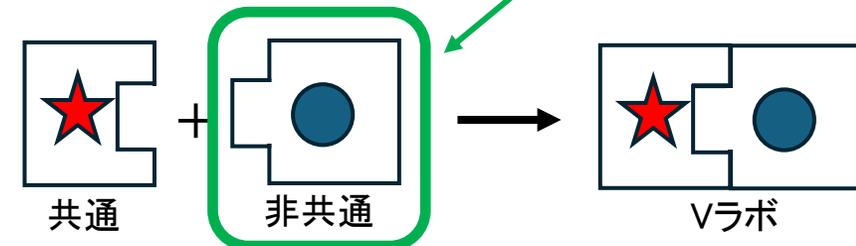


・本プロジェクトは始動段階で、各Vラボにおける詳細テーマ設定、および、課題推進者(PI)選定を、2025年度前半ごろに行なっていく(*)。

連続ワークショップで、オープンな意見交換を行う。

(*)

- ・想定するPI像: VラボA, B, C合計で、最大十数名。
典型的には、ポストク1名を雇用して、プログラムの開発・応用に従事。



- ・2026年度以降は、要素技術開発や特定応用を想定して、短期課題(1-2年)も設定していく予定。

プログラム

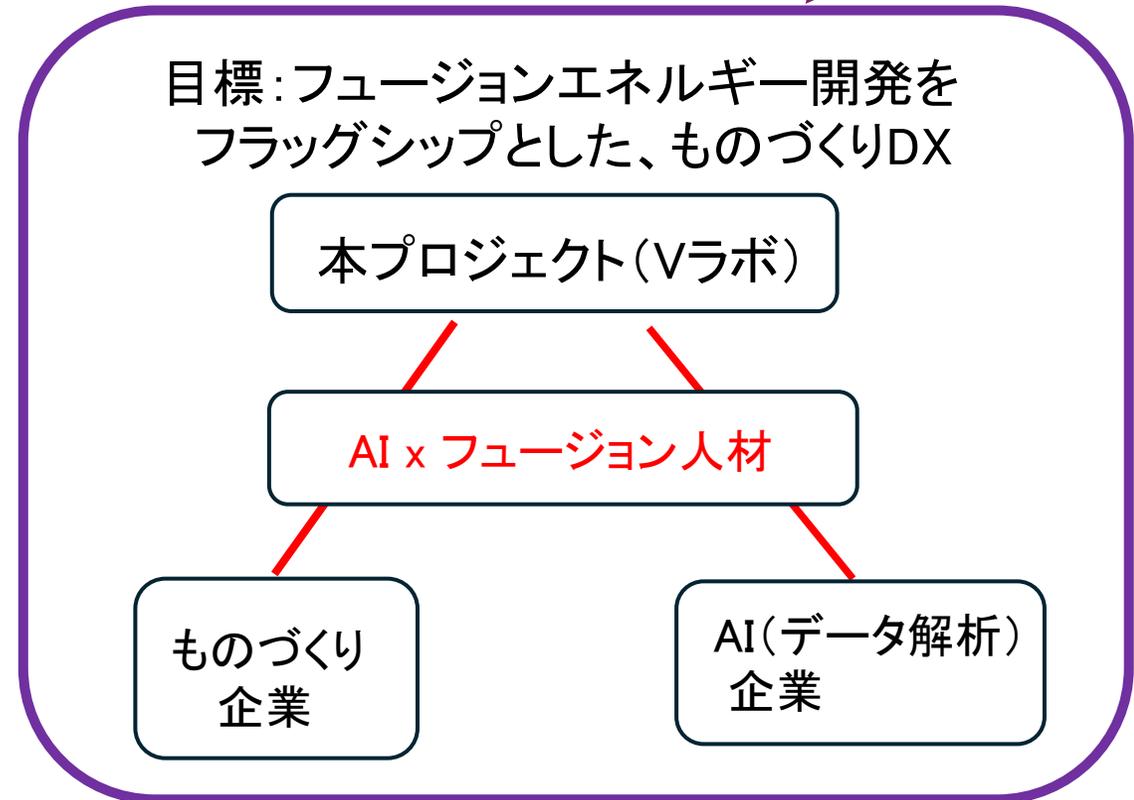
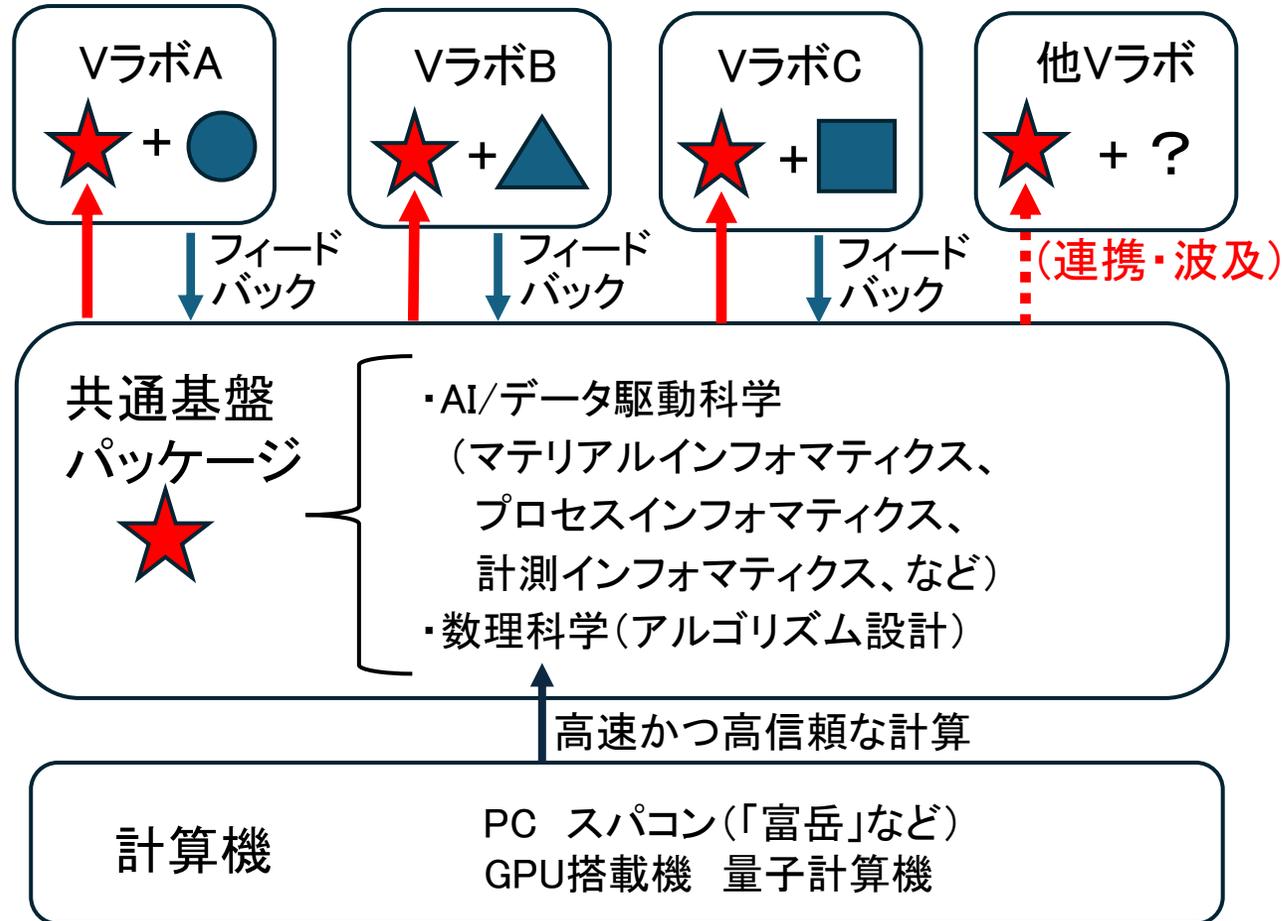
- ・「はじめに」、星健夫 (MS10PM) (5分)
- ・「フュージョンエネルギー科学のフロンティア(仮題)」、吉田善章 (MS10PD) (30分)
- ・「多様なフュージョンエネルギー開発にむけたバーチャルラボラトリ～MS10
「デジタルシステム」プロジェクトの目指すもの～」、星健夫 (MS10PM) (30分)
- ・「フュージョンエネルギーにおけるAI×データ戦略」、武田晴夫
(内閣府人間中心のAI社会原則会議構成員、内閣官房Trusted Web推進協議会構成員、
核融合エネルギーフォーラム運営委員、日立製作所 科学技術顧問) (10分)
- ・「信頼性のあるデータスペース」、越塚登 (東京大学 大学院情報学環 教授) (30分)
- ・「生成AIを活用したプログラム開発」、吉見一慶 (東京大学物性研究所 特任研究員) (30分)
- ・「AI for Science: シミュレーションベース機械学習」、
上田修功 (理化学研究所 革新知能統合研究センター副センター長) (30分)
- ・「磁場閉じ込め型フュージョンエネルギーシステムの概要と課題」、福山淳 (京都大学 名誉教授) (20分)
- ・「慣性型フュージョンエネルギーシステムの概要と課題」、高部英明 (大阪大学 名誉教授) (20分)
- ・全体討論
- ・「おわりに」、星健夫 (MS10PM)

波及：産学連携からものづくりDXへ

3種バーチャルラボラトリ(Vラボ)を先行成功例として、社会実装する。.....→ 波及：他のVラボ構築

- ・ VラボA: 磁場閉じ込め型フュージョンエネルギーシステム
- ・ VラボB: 磁場閉じ込め型以外のフュージョンエネルギーシステム
- ・ VラボC: 中性子照射などの材料実験施設

(多様なフュージョンエネルギーシステム、他物理分野、**産業界**)



→ 秋頃:産学連携型イベント(ニーズ調査)

まとめ

- (1) 生成AIにより、数値データ(実験データ、シミュレーションデータ)のみならず、プログラムコードや文書も、扱えるようになった。
- (2) 「AI×データ戦略」=データ生成・共有・活用の一貫的戦略。
- (3) ムーンショット目標10「デジタルシステム」プロジェクトでは、共通基盤パッケージを共有する、3種Vラボ
 - ・ VラボA: 磁場閉じ込め型フュージョンエネルギーシステムむけ Vラボ
 - ・ VラボB: 磁場閉じ込め型以外のフュージョンエネルギーシステムむけ Vラボ
 - ・ VラボC: 中性子照射などの材料実験施設むけVラボを構築し、未来予測技術を実現することが「データ活用」の中心課題。
- (4) 展望:本研究会の参加メンバーとの連携

(*)連続ワークショップ「未来予測型バーチャルラボラトリによる多様なフュージョンエネルギーシステム(FES)開発」

総論と戦略
(3/3)

VラボB (3/19)

VラボA (3/24)

VラボC (3/26)

開催情報(第1-4回で共通)

・場所:東京駅付近(ハイブリッド開催)

・第1回を除いて、講演募集あり。

・情報ページ(第1回) <https://indico.nifs.ac.jp/e/ms10ds-ws2025mar-1>
(第2-4回の情報もたどれる)