

はじめに

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門
情報統合型物質・材料研究拠点 拠点長 伊藤 聡

公益財団法人 佐賀県地域産業支援センター
九州シンクロトロン光研究センター 所長 平井 康晴

物質・材料研究機構（NIMS）と九州シンクロトロン光研究センター（SAGA-LS）の合同シンポジウム「新しいデータサイエンスが導く材料創生と放射光解析のコラボレーション」の開催にあたりましては多数のご参加をいただき、誠に有難うございました。

今回の合同シンポジウムでは、上記2機関と国立研究開発法人科学技術振興機構の主催により、現代社会の諸課題－エネルギー・資源等の偏在・枯渇、大気・水・土壌等の環境劣化、少子化による生産性停滞等－を解決し持続可能な将来を拓くイノベーションの創出を、「新しいデータサイエンスが導く材料創生と放射光解析のコラボレーション」により促進する試みについて議論することとしました。そして、NIMSの大規模材料データベースと機械学習の解析ツール等を基盤とする「マテリアルズインフォマティクス」の研究と新しい電池材料の提案や半導体材料の設計手法の開発、材料計測データや文献データの収集とデータベース化、機械学習のツールであるスパースモデリングやベイズ推定法等を用いた「計測インフォマティクス」の研究とシンクロトロン放射光を用いた材料の EXAFS 測定データ等に対する新しい解析法の提案等が示されました。これにより、従来限界を超える知見を得るための新しい方法論の構築と、それを材料創生や実用化に適用する新しい可能性を探ることが出来たのではないかと思います。

当日は98名の方にご参加いただき、概況報告2件、特別講演2件、BL紹介、一般講演8件が行われ、産学官のそれぞれの立場から大変興味深い発表と質疑応答をいただきました。本企画が今後の皆様方の活動にとって有意義なものとなれば幸いです。

今後共、皆様に信頼される研究機関として一層の努力を行ってまいりますので、ご支援、ご協力を賜りますよう宜しくお願い申し上げます。

(2017.11.30)

－ 新しいデータサイエンスが導く材料創生と放射光解析のコラボレーション －

物質・材料研究機構／九州シンクロトロン光研究センター合同シンポジウム

第11回九州シンクロトロン光研究センター研究成果報告会

文部科学省先端研究基盤共用促進事業共用プラットフォーム形成支援プログラム

【開催趣旨】

エネルギー・資源・食料等の枯渇・偏在、大気・水・土壌等の環境劣化、少子化等による生産性停滞等の諸課題を解決する糸口を見つけ、持続可能で活力のある社会を築くために、科学技術分野のイノベーション創出が求められています。そのためには、材料・物質に関するビッグデータから機械学習により規則や知識を抽出し、省エネルギー、省資源、低環境負荷、高生産性等を実現する物質・材料の創生に活かすことが極めて重要です。さらに、シンクロトロン放射光でそのような物質・材料の構造と機能を計測し、機械学習の技術であるスパースモデリング或いはベイズ推定法等でデータを解析して従来限界を突破する知見を得、新たな材料創生や実用化を促すことが必要です。今回の合同シンポジウムでは、新しいデータサイエンスが導く材料創生と放射光解析のコラボレーションについてその可能性を探ります。

【日 時】 2017年8月9日（水）10：00～17：05

【場 所】 科学技術振興機構 東京本部（サイエンスプラザ）大会議室（地下1階）

【主 催】 公益財団法人 佐賀県地域産業支援センター 九州シンクロトロン光研究センター

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）

国立研究開発法人 科学技術振興機構

【後 援】 佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター

九州大学シンクロトロン光利用研究センター

九州大学クリーン実験ステーション

九州シンクロトロン光研究センター利用推進協議会

佐賀県

【協 賛】 光ビームプラットフォーム

日本放射光学会

SPring-8利用推進協議会

【参加費】 無 料

【研究交流会】 於：食堂（地下1階）（参加費 3,000円）

開会挨拶・概況報告

10:00~10:25	NIMSでのマテリアルズインフォマティクス研究概要紹介 伊藤 聡 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 …………… 1
10:25~10:45	九州シンクロトロン光研究センターの概況 平井 康晴 九州シンクロトロン光研究センター …………… 3

特別講演

10:45~11:25	ベイズ計測による計測科学の情報数理基盤 岡田 真人 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 …………… 8
11:25~12:05	EXAFSスペクトルのスパースモデリング 赤井 一郎 熊本大学 パルスパワー科学研究所 …………… 11
12:05~13:05	----- 昼休み -----

ビームライン紹介

13:05~13:25	九州シンクロトロン光研究センターの県有ビームライン 岡島 敏浩 九州シンクロトロン光研究センター …………… 14
-------------	--

一般講演

13:25~13:50	スパースモデリングのEXAFSスペクトルへの適用 瀬戸山 寛之 九州シンクロトロン光研究センター …………… 18
13:50~14:15	住友電気ビームライン (BL16/17) の現状 山口 浩司 住友電気工業株式会社 解析技術研究センター …………… 22
14:15~14:40	重金属吸着剤としてのゼオライト表面修飾パーライトの合成と構造解析 笠井 誠 三井金属鉱業株式会社 パーライト事業部 …………… 26
14:40~15:05	リサイクルプラスチックの劣化機構と物理再生 - シンクロトロン光による内部構造からの考察 - 八尾 滋 福岡大学 工学部 …………… 30
15:05~15:20	----- 休憩 -----

一般講演

15:20~15:45	電子顕微鏡の多様なデータとインフォマティクスによる解析への期待 三石 和貴 物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点 原子構造物性分野 実働環境計測技術開発グループ …………… 38
15:45~16:10	ToF-SIMSにおける大容量データの扱い 岩井 秀夫 物質・材料研究機構 技術開発・共用部門 微細構造解析プラットフォーム …………… 44
16:10~16:35	スパース位相回復法による磁気イメージング 山崎 裕一 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 …………… 49
16:35~17:00	量子ビーム実験、構造モデリング、トポロジカル解析を併用した不規則系物質の構造解析 小原 真司 物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点 光・量子ビーム応用分野 シンクロトロンX線グループ …………… 53

閉会挨拶

17:00~17:05	平井 康晴 九州シンクロトロン光研究センター
-------------	------------------------

研究交流会

17:15~18:30	於：食堂（地下1階）
-------------	------------