

SPring-8 利用推進協議会
「SPring-8 データ科学研究会」趣意書
(旧名称「SPring-8 材料構造の解析に役立つ計算科学研究会」)

1. 目的

放射光科学の発展により齎された数々の放射光利用分析評価技術は、それらの汎用化と先端化により広く深く普及し、民間企業の研究開発業務において重要なツールとなっている。一方、データの処理方法や解析方法を研究対象とし、統計学、機械学習、人工知能、探索・最適化などの諸分野を含むデータ科学は近年、放射光利用者をはじめ企業の材料開発研究者らの注目を集めている。その背景として、計測技術の発展により取得データが爆発的に増えたことや、物質・材料の研究開発に対してデータ科学の技法を適用する方法論であるマテリアルズ・インフォマティクスが、我が国において社会実装につながる進展を見せていることなどが挙げられよう。

マテリアルズ・インフォマティクスによる材料探索では、計測実験や第一原理計算などの計算科学の手法で得られたデータの包括的な解析からモデルを見出す、即ちデータ駆動型のアプローチが採られている。同様に、高コスト計測の実験計画最適化や、取得データに基づくモデルによるスペクトル解析など、計測実験へのデータ駆動科学の適用も提案されており、計測インフォマティクスによる放射光利用成果の最大化が期待される。

そこで本研究会では、

- マテリアルズ・インフォマティクスによる材料探索に携わる第一人者や計測インフォマティクスの先端研究者らを講師としてお招きする講演会、および
- 放射光利用者らに役立つデータ科学の技法の実習（初級／中級／テーマ別など）

を行う。実習ではデータ解析や機械学習のパッケージが使い易い Jupyter Notebook/ Python の環境で処理コードを持参の PC 上で実行し理解を深める。

これらの活動を通して、放射光実験研究者らがデータ科学の様々な手法をより身近なツールとして活用できるよう後押しするとともに、企業の材料開発研究者とマテリアルズ・インフォマティクスの研究者の交流を通して、企業の材料研究開発の深化や加速に貢献することを目指す。

2. 活動内容

1) 活動方針： 企業の放射光利用者らに役立つ計測インフォマティクスの手法をはじめ、材料開発を加速するマテリアルズ・インフォマティクスの先端研究成果を紹介し、それらの活用を推進することにより、放射光産業利用成果の最大化を図る。また、マテリアルズ・インフォマティクス諸技術の社会実装およびそれらの民間企業における利活用を推進し、我が国の産業技術の発展に資する。

2) 対象： 放射光利用分析評価およびデータ駆動型の研究開発の対象となる物質や材料全般

3) 活動期間・開催頻度

期間：2019年度 ～ 2020年度（2事業年度）

頻度：3回程度／2年間

4) メンバー

研究会主査：横山 和司 （公財）ひょうご科学技術協会

放射光研究センター センター長

幹事：佐野 則道 JASRI 産業利用推進室 コーディネータ

会員：SPring-8 利用推進協議会会員企業、その他の産官学からの希望者。

関連する学、協会からの協賛を得て広く募集する。