



平成 29 年 4 月 17 日

報道関係者各位

大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構
高効率モーター用磁性材料技術研究組合

量子ビーム実験・計算データをウェブ上で 高速解析する可視化システムを開発 －自動車用磁性材料開発のための最強ツール－

本研究成果のポイント

- 次世代自動車モーター用新規磁性材料の開発を効率化するためのツール「磁性材料データベース可視化システム」を開発
- 量子ビーム実験と大規模シミュレーションのデータを融合して、データベース化し、解析・可視化することに成功
- 巨大になる将来の量子ビーム実験データから、材料開発に必要な情報を抽出できる、効率的な研究開発のプロトタイプとなるシステム

【概 要】

大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所の准教授 小野寛太と、高効率モーター用磁性材料技術研究組合*1 (MagHEM) は、量子ビーム実験やシミュレーションの膨大なデータを統合的に扱い、ウェブ上で解析・可視化するシステムを開発した。KEK 計算科学センター内に設置され、3月から MagHEM が自動車モーター用新規磁性材料の研究開発のため利用している。

将来、加速器の高性能化によって量子ビーム実験データが膨大になり、現状の方法ではデータ解析が不可能になると考えられている。また、大量の材料データ群から情報科学的手法を用いて新しい知見を引き出す新たな材料設計技術「マテリアルズ・インフォマティクス」(Materials Informatics = MI) を用いて、量子ビーム実験データやシミュレーションデータから材料データを効率的に抽出する技術の開発が求められている。今回開発したシステムは、大型の放射光施設などで研究の大幅な作業効率化を図るための先駆けとなる技術である。

この成果は、2016年9月14日 情報処理学会研究報告「マテリアルズ・インフォマティクスのための大規模多次元データベースシステムの提案」として発表された概念を実用化したもので、国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

(NEDO)の委託事業 未来開拓研究プログラム「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」の結果得られたものである。

【背景】

材料開発は従来、経験に基づいて新しい材料を試作しては評価する地道な作業の繰り返しだった。ところが近年、量子ビームを用いた材料の高効率な評価や、MIを利用した材料探索が欠かせないと考えられるようになってきた。基礎物理法則に基づく緻密な数値シミュレーションにより新規材料の特性を評価するだけでなく、他者の作成したデータを再利用して既存材料の特性を再評価することが効率化につながる。そのためにはビッグデータ向けのデータ管理システムの導入が必要になる。

自動車用材料開発の分野でも量子ビーム実験とMIを活用する機運は高まっていたが、量子ビーム実験やシミュレーションでデータのフォーマットが統一されていないことなどから、実際には研究者たちは、個別のプログラムを作成して計算や解析・可視化をする必要があり、企業ユーザなどにとって量子ビーム実験とMIを取り入れることが困難だった。

もう一つの課題は、扱うデータの大きさと分析の複雑さである。例えばKEKで高精度に計算した磁性材料のシミュレーションデータは一つの材料あたり約150億件・7テラバイトもある。3次元の空間座標に対する物理量があり、それが磁場や時刻とともに変化するので、これらすべてを組み合わせた数のデータがあるからだ。そのような巨大データセットを研究者がそれぞれ管理しパソコンで解析することは不可能に近く、複雑な計算をも同じシステム内で処理することが効率化につながる。海外では米国のオークリッジ国立研究所で、実験・シミュレーションデータの解析と管理をスパコンで一括して行う電子顕微鏡用システムCADES*2が開発段階にある。日本でも実験やシミュレーションデータのデータベースと解析システムの融合が待たれていた。

【研究内容と成果】

研究チームは、高速データベースに既存のビッグデータ解析用システムやオープンソースモジュールを組み合わせ、データをウェブ上で高速に扱うシステムを開発した。このデータベースシステムには、1.2テラバイトのハードディスクを76台と6テラバイトを120台並べた巨大ストレージが接続されている。これにより、量子ビームを使った実験で、計測データから材料の重要なデータを自動的に抽出することや、本格的な実験の前にシミュレーションデータを利用して予備的な分析を行うことが可能になった。

本システムで、これまで自作プログラムで33時間かかった解析が1時間以下に短縮できた。例えば、高い磁気特性を持つ材料に必要な要件を抽出し可視化することで、材料内部の磁気構造を把握することが可能である。また、Python, R, SQL*3 などによる解析機能をシステム上に実装することができるため、最新の機械学習アルゴリズムを追加することが可能で、そのアルゴリズムはユーザ間で共有できる。SQLを用いることで、従来のプログラム言語で500行書いていたものが、1行で高速に解析できるようになった。

また、本システムでは最大500テラバイトまでのデータを扱うことができる。構造化された形式になっていない計測データも、データベース化することによって形式が統一され、共通の解析ソフトウェアが使える。個人の権限で閲覧できるデータを限定するなど、データを安全に管理することができる。ユーザは解析用のソフトウェアやデータを持たなくていいので、安全性の問題は解決できる。必要な結果はウェブブラウザでどこからでも可視化・解析ができる。高度なITスキルを持たない人でも扱いやすい仕様で、同時に多数でアクセスできるので、共同研究者とのデータ共有や解析結果の共有が簡単にできる。

論文情報：情報処理学会研究報告「マテリアルズ・インフォマティクスのための大規模多次元データベースシステムの提案」 Vol.2016_DBS_163 No.11, Vol.2016_IFAT_123 No.11,2016/9/14

【今後への期待】

将来的には、一定の条件で実験データを公開し、データを採った研究者には役に立たないと考えられていたデータ群から重要な材料データを抽出するデータマイニング*4 を可能にすることで、材料開発の効率化を図りたい。

システムには今後、さまざまな形式の実験データをシステムが自動的にデータベース化する機能の開発や、実験結果を取り込むと対象の材料に関連する情報を推薦するレコメンドシステム、材料特性予測機能などを取り入れる計画である。

【参考図】

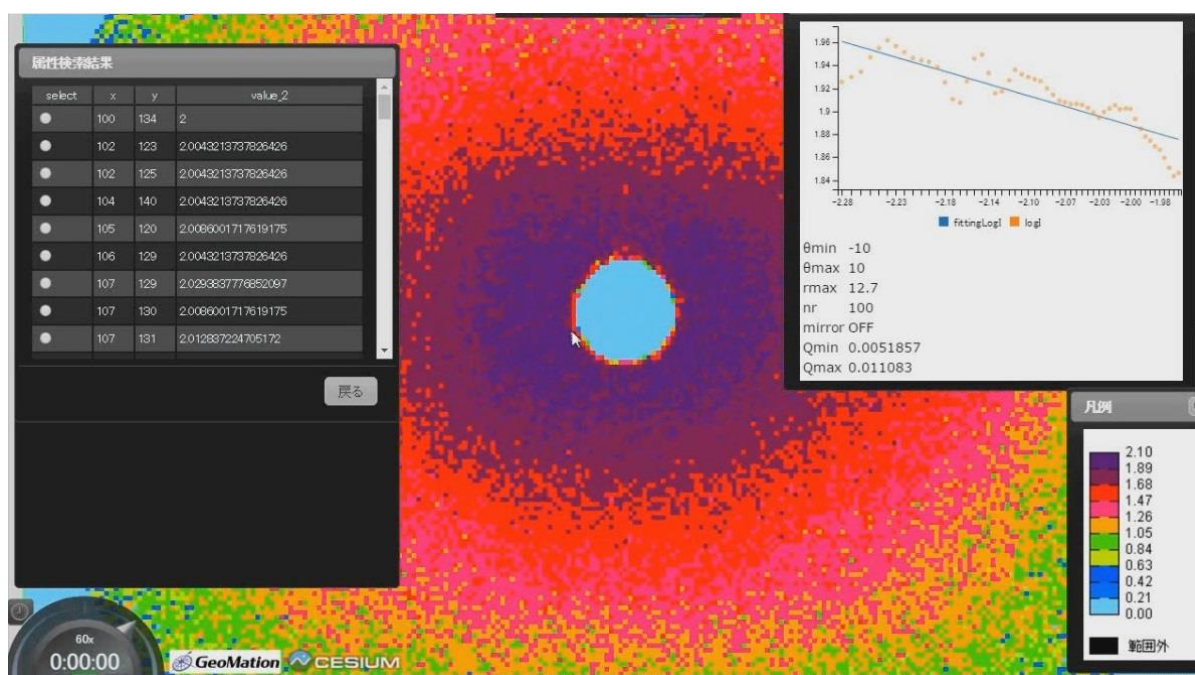


図1：「磁性材料データベース可視化システム」の中性子実験データの2次元表示画像（中央）とその解析結果（右上）（一部）



図 2 : 「磁性材料データベース可視化システム」の外観

【用語解説】

*1. 高効率モーター用磁性材料技術研究組合 【Technology Research Association of Magnetic Materials for High-Efficiency Motors (MagHEM)】 :

組合員の協同による高効率モーター用磁性材料及びこれを用いたモーター設計に関する試験研究その他、組合員の技術水準の向上及び実用化を図るための事業を行うことを目的として設立された技術研究組合。理事長は大山 和伸、構成組織は、一般財団法人金属系材料研究開発センター・国立研究開発法人 産業技術総合研究所・ダイキン工業株式会社・株式会社デンソー・トヨタ自動車株式会社・三菱電機株式会社・株式会社明電舎の2団体・5企業。

*2. CADES 【The Compute and Data Environment for Science】 :

アメリカ・オークリッジ国立研究所にある電子顕微鏡の膨大なデータを迅速に解析し、クラウドデータとして管理する、遠隔で操作可能なシステム。

*3. PythonやR : 統計分析・機械学習の分野で広く使われているプログラム言語。

SQL : データベースで主に使われているプログラム言語。

*4. データマイニング 【data mining】 :

大量のデータの中から重要な情報を抽出する手法。

【お問い合わせ先】

< 研究内容に関すること >

大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構
物質構造科学研究所 准教授 小野 寛太
Tel: 029-864-5659
e-mail: kanta.ono@kek.jp

< 報道担当 >

大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構
広報室長 引野 肇
Tel: 029-879-6047
Fax: 029-879-6049
e-mail: press@kek.jp

高効率モーター用磁性材料技術研究組合
専務理事 作田 宏一
Tel: 03-3592-0189
Fax: 03-3592-1285
e-mail: ksakuta@maghem.jp