

課題推進者(PI)募集における PM の方針

2025 年 6 月 9 日 自然科学研究機構 核融合科学研究所 星健夫

1. プロジェクトの概要

本研究開発プロジェクトの目標は、複数のバーチャルラボラトリ(Vラボ)を構築し、それを社会実装することで、フュージョンエネルギーシステム(FES)の研究開発を劇的に加速させることです。このプロジェクトでは、シミュレーションや実験データを基盤としながら、近年急速に発展しているAIやデータ駆動科学を取り込み、異なる分野の研究者が連携する学際的なチームでVラボを構築することで、FESの研究開発に革新をもたらすことを目指します。Vラボは、学際

的なチームによって、現行装置の実験データ、理論モデル、シミュレーションデータなどを統合し、最終的に未来のFESやその中に含まれる実験装置の性能を予測できるデジタル空間上の実験システムとして構築されます(図1参照)。このシステムは単一のテーマに特化したデジタル実験システムではなく、FES開発が直面する様々な要素課題や異なる階層での複合的課題、さらには異なる炉形式に対応した開発課題に幅広く活用されることを目標としています。



図1 未来予測型バーチャルラボラトリ(Vラボ)の概念図

2. Vラボ構築における特徴

本プロジェクトでは、様々な課題に対応する共通基盤(プラットフォーム)となる「ジェネリックVラボ(G-Vラボ)」の構築に取り組むチームと、具体的なFES(フュージョンエネルギーシステム)開発向けのVラボの成功例を示すチームが協働して推進します。後者のVラボは、対象となる実験装置の模擬や、必要な物理プロセスを統合したシミュレーションとの連携によって構築されるものであり(図2参照)、今回の募集では、この後者の取り組みにお

けるPIを募集します。PIには、具体的な研究テーマを設定して(第3章に記載の3分野のいずれかに属するもの)、4年間の研究開発を通じてVラボ実験と実際の実験のベンチマークを行い、Vラボの有用性を実証する役割が期待されます。この取り組みによって、本プロジェクトが構築するデジタル空間がフュージョンエネルギー・イノベーションの世界的拠点となるための成功事例を示していただきます。

本プロジェクトにおけるVラボ構築の特徴は以下の2点にあります。

(i) 汎用性のあるVラボ(ジェネリックVラボ、G-Vラボ)の開発を行い、そのカスタマイズを通じて、様々なVラボを実現します。

FES開発は総合工学であり、未来予測型のVラボが求められる対象は、プラント全体、プラントの一部、計測機器、部材、材料など、多岐にわたります。これら全てに対応できるようにするため、Vラボを構成するモジュール(小規模コード)を「共通基盤モジュール」と「分野別モジュール」に分類し、両者を組み合わせることで多様なVラボを構築します(図2および図3参照)。

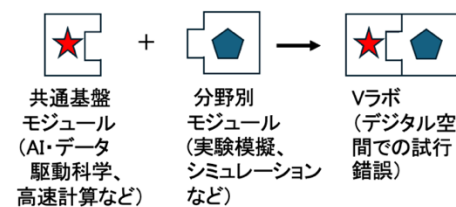


図2 Vラボの構築(模式図)

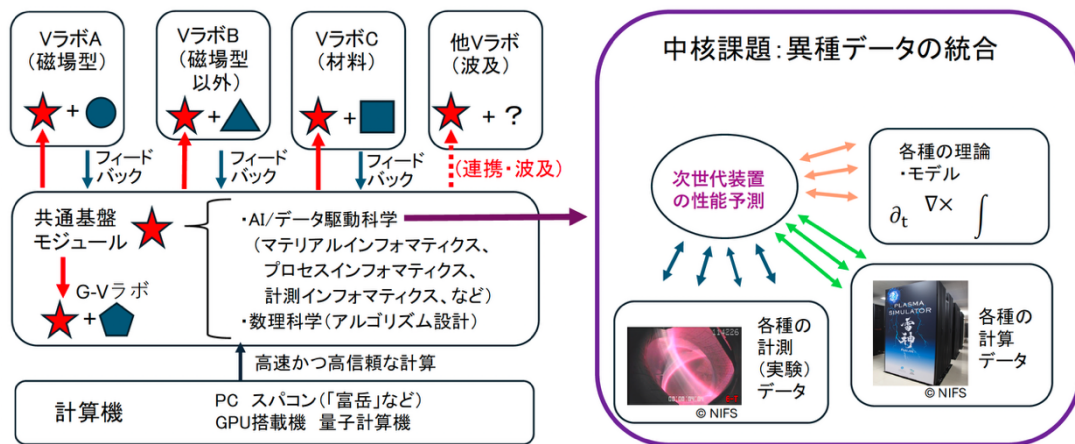


図3 ジェネリックVラボ(G-Vラボ)とVラボA-Cの関係

共通基盤モジュールは、AI やデータ駆動科学型解析を活用した機能を提供するものであり、具体的にはマテリアルインフォマティクス、プロセスインフォマティクス、計測インフォマティクスなどの解析や高速計算を含みます。このモジュールはそれぞれの分野の専門家によって開発されるものであり、詳細については本文書内の「付記」をご参照ください。なお、現在すでに 7 名の課題推進者が所属しており、ニーズのあるモジュールを開発することで本研究開発プロジェクトに寄与しています(詳細は募集要項の付記をご参照ください)。一方で、分野別モジュールについては、V ラボが対象とする特定の実験に関連する機能を提供します。この分野別モジュールは、例えばプラズマやマテリアルに対するシミュレーションの実施や実験模擬を含むものであり、対象となる実験に応じて個別に設計・開発される必要があります。今回、本募集ではこれら分野別モジュールの開発を担当するPIを募集します。なお、V ラボの詳細については、本文書内の付記を併せてご参照ください。

(ii) 多様な V ラボを構築するために、非公開データも含めた世界規模の「データスペース」を実現することを目指します。

V ラボの構築には、実験データ、シミュレーションデータ、コードなど、様々なデータが必要となります。しかしながら、FES 分野においては、多くのデータが非公開であることが現状であり、この状況が様々な V ラボの構築を困難にしています。

そこで本プロジェクトでは、DFFT (Data Free Flow with Trust、信頼関係に基づくデータ流通)の技術を活用し、非公開データも含めた世界規模の「データスペース」を実現することを計画しています。このデータスペースは、データを共有するためのバーチャル空間として機能し、信頼性の高い環境のもとで、様々なデータが効率的かつ安全に流通できる仕組みを提供します。この仕組みにより、多様な V ラボの構築が可能となり、FES 分野における研究開発の大幅な進展に寄与すると期待されます。

3. PIに期待すること

PIには、現実の実験をデジタル空間上で再現するため、他のPIと密接に協力しながら各Vラボを構築することが期待されます。本募集では、以下の3つの分野を対象とし、合計で最大10数名程度のPIを選定する予定です。

- **分野A: 磁場閉じ込め型 FES 向け V ラボ**

トカマク型やヘリカル型などの磁場閉じ込め型 FES 開発に向けた V ラボを構築します。たとえば、次世代装置設計を最終目的とした要素プロセスの統合や性能予測、異なる炉形式の比較を可能とする性能予測などが、研究テーマとして挙げられます。

- **分野B: 磁場閉じ込め型以外の FES 向け V ラボ**

慣性型やミュオン触媒型などの磁場閉じ込め型以外の FES 開発に向けた V ラボを構築します。たとえば、FES が可能となる物理的・技術的条件を数値計算などで定量的に予測することや、FES の予測に必要な要素の数理モデルを開発・統合することなどが、研究テーマとして挙げられます。

- **分野 C: 中性子照射材料実験とマテリアルサイエンスに関する V ラボ**

FES 開発に関連する広義のマテリアルサイエンス研究に向けた V ラボを構築します。たとえば、中性子照射された材料の寿命予測や、プラズマ・壁相互作用の予測などが、研究テーマとして挙げられます。

注 1: PI が実験系研究者である場合には、実験系研究者の役割としては、既存の実験データの提供、実験データの解析、次期実験条件の策定、次期実験装置の設計などで、V ラボを活用することが期待されます。その場合、V ラボに必要なモジュールの開発は、研究参加者や他 PI と協力して実施することが想定されます。

注 2: 応募に際しては、上記の分野 A、B、C のの中から自身の研究テーマに最も近い分野を選択してください。また、分野横断的な研究による相乗効果も期待されており、提案内容が複数の分野にまたがる場合には、一番近い分野を選択してください。なお、分野 A、B、C は合同で審査を行い、選考基準に差はありません。

注 3: 今回選ばれた PI に加えて、今後の研究進展に応じて新たな PI を追加する予定です。必要な要素技術を加えたり、特定の応用研究を進めたりするために、短期間の研究開発課題を担当する PI を加えることも考えられます。

4. 研究提案における重要なポイント

- **未来予測の定量的目標設定**

対象とする V ラボが「何を」「どの程度」「どのように」予測するのかについて、具体的かつ明確に記載してください。まず、「何を」予測するのかとは、例えば対象となる実験装置の性能や実験結果を指します。次に、「どの程度」予測するのかは、絶対値への精度を示すだけではなく、異なる実験手法間での比較や異なる条件下での精度も含まれます。そして、「どのように」予測するのかは、AI やデータ駆動科学（例えばベイズ推定など）を用いた予測手法の確立を指します。さらに、研究期間内に、V ラボの未来予測機能をどのように検証するかについても具体的に記載してください。既存の実験データをベンチマークとして活用することが検証手法の一例となります。この場合、既存実験データを学習データとテストデータ（学習データから外挿領域にあるデータ）に分割し、学習データを基にテストデータを予測する能力を評価する方法が考えられます。また、異なる実験装置の実験データを予測する手法も有効です。例えば、ある既存実験装置のデータを基に、別の既存実験装置の実験データを予測することが検証手法となり得ます。さらに、上記の未来予測が FES 開発にどのようなインパクトを与えるのかについても具体的に記載してください。例えば、予測手法の精度や効率性が向上することで、FES 開発における研究開発加速やコスト削減にどのように寄与するのかを示してください。

- **異種データの統合**

高信頼な未来予測を実現するためには、各種実験データやシミュレーションデータなど、異なる種類のデータを AI やデータ駆動科学に基づいて統合し、それらの知見を結びつけることが重要です。この「異種データの統合」に対する考え方や方針を具体的かつ明確に記載してください。例えば、(i) 様々な階層のプロセスを対象としたシミュレーションデータを統合する方法、(ii) 実験データとシミュレーションデータを統合する、広義のデータ同化のアプローチ、(iii) 異なる信頼性を持つシミュレーション結果を統合する場合の具体的な手法、(iv) 目的とする実験データが現状では存在しない場合の方策、などが考えられます。さらに、これらの取り組みが他 PI との協力を必要とする場合には、協力の具体的な内容や計画についても明記してください。他 PI との協力を通じて、どのようにして異種データの統合を進

めるのか、またその結果として生み出される知見がどのように未来予測に活用されるのかを具体的に示してください。

付記. V ラボの技術仕様

本プロジェクトでは、V ラボの実現方法の一つとして、PM(プロジェクトマネージャー)らが開発してきた汎用データ解析フレームワーク「ODAT-SE(オーダットエスイー;旧称 2DMAT)」^{4, 5}の活用を予定しています。ただし、ODAT-SEを用いない提案についても歓迎します。図4には、Vラボの一例として、ODAT-SE(図2の「共通基盤モジュール」)と実験模擬モジュール(図2の「分野別モジュール」)の組み合わせを示しています。ODAT-SEの活用による主な用途としては、以下のような取り組みが挙げられます。まず、実験データ解析(逆問題解析)を行うことで、実験データから得られる知見を最大化します。次に、次期実験条件の策定(最適化)や次期実験装置の設計(仕様最適化)を支援することで、研究プロセスや装置開発の効率化を図ります。また、デジタル空間での試行錯誤を通じて革新的な装置を提案することも期待されます。実験模擬モジュールは、実験を模擬する数理モデルを指し、入力量(X)と出力量(Y)(スカラー量またはベクトル量)を関数としてモデル化する場合(例: $Y = Y(X)$)や、確率分布としてモデル化する場合($P(Y|X)$;ベイズモデリング)があります。このモデル化においては、偏微分方程式の解法など複雑な計算を必要とする場合もあります。ODAT-SEは、データ空間での大域的な探索を実現する数理アルゴリズムを提供しています。代表的な機能として、最適化(並列ベイズ最適化;大域最適解 $X^* \equiv \operatorname{argmin}_X Y(X)$ の計算)や、ベイズ推定(並列化モンテカルロ法;ベイズ事後確率分布 $P(X|Y)$ の計算)が挙げられます。これらのアルゴリズムは並列化された Python を基盤として実装されており、パソコンから「富岳」のようなスーパーコンピュータまで、幅広い計算環境で高速かつ高信頼な解析を実現します。また、実験模擬モジュールに高速性が求められる場合には、Fortran や C 言語でモジュールを開発することでさらなる高速化を図っています。共通基盤モジュールとして提供される機能は多岐にわたります。例えば、基盤的数値計算(線形計算など)を先進的なアルゴリズムで高速化する技術、ニューラルネットワーク型サロゲートモデルを活用したシミュレーションの高速化、不確かさの定量評価、次元削減、実験データと計算データの統合、装置最適化(例:計測装置における分解能とSN比のバランス最適化)などが含まれます。また、転移学習や誰でも高速かつ高信頼な解析を可能とする自動最適化技術、高精度計算と低精度計算データの融合を含むデータ統合(広義のデータ同化)も提供されています。本募集のPIには、これら共通基盤モジュールの開発者である既存のPIと協力し、新たなアプローチや技術開発を推進していただくことが期待されます。Vラボ構築における創造的な取り組みを通じて、さらなる研究の進展と技術革新を実現することを目指してください。

⁴ ODAT-SE(旧称:2DMAT)Web ページ; <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>; Y. Motoyama, *et al.*, Comp. Phys. Commun. 280, 108465 (2022).

⁵ ODAT-SE ミーティング、2025 年 5 月 8 日; <https://indico.nifs.ac.jp/e/odatse-meeting-202505>

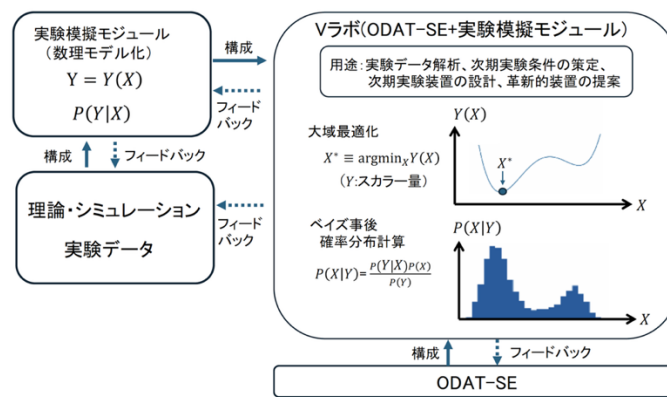


図 4 汎用データ解析フレームワーク ODAT-SE を用いた V ラボの例 (模式図)