



研究開発項目1-1 ジェネリックVラボの構築と有用性実証

PI: 星健夫 (NIFS 教授, 兼PM)

主な研究参加者: 境健太郎 (NIFS, 助教)

これまでの研究・活動内容

(略歴)

1993年 東京大学工学部物理工学科卒業

2023年より 現職

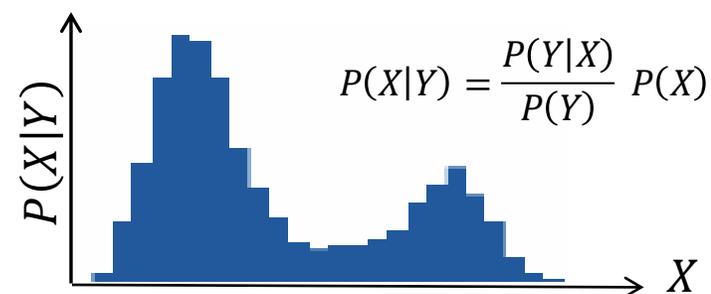
(現在の専門分野)

データ駆動科学、計算物質物理学、プラズマ科学、数理学

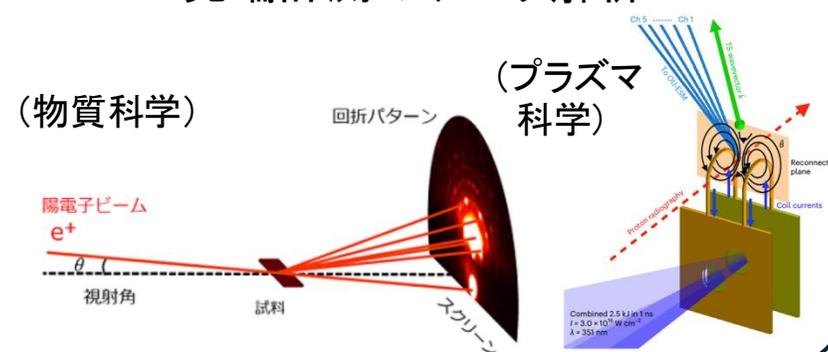
(これまでの研究例)

- ・(実験物質物理学) 超伝導物質研究(卒業研究)
- ・(計算物質物理学) 大規模電子状態計算の理論と応用
 応用: 固体脆性破壊、金属ナノワイヤ形成、
 有機エレクトロニクスデバイス、リチウム電池材料、など
- ・(数理学) 超並列アルゴリズム(シフト型クリロフ理論など)
- ・(データ駆動科学手法) **超並列モンテカルロ法によるベイズ推定**
- ・(計測インフォマティクス) **先端計測のデータ解析**

ベイズ事後確率分布 $P(X|Y)$ の概念図



先端計測のデータ解析





研究開発項目1-2 デジタルプラットフォームの構築と有用性実証

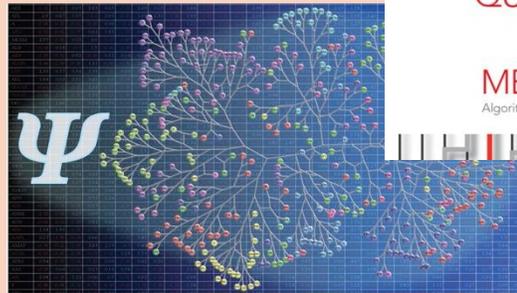
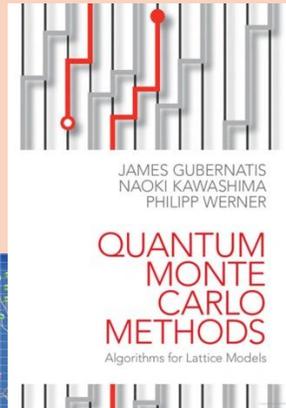
PI: 川島直輝 (東京大学 物性研究所 教授)

主な研究参加者: 吉見一慶(東京大学 物性研究所 PASUMUSプロジェクトマネージャー)

これまでの研究・活動内容

計算物質科学の手法やソフトウェアの開発

量子モンテカルロ法



テンソルネットワーク法による生成モデル

PASUMS (スーパーコンピュータ向けオープンソースソフトウェア開発プロジェクト)

2015年～



2023年 HPCIソフトウェア賞

MateriApps (計算物質科学向けソフトウェアポータルサイト)の構築



2024年3月度

ユーザ数 5,570 PV数 14,993

2019年 文部科学大臣表彰科学技術賞 (科学技術振興部門)

2023年 HPCIソフトウェア賞 (普及部門)



研究開発項目1-3 計測インフォマティクスを中心としたAI/データ駆動科学 応用手法の構築と有用性実証

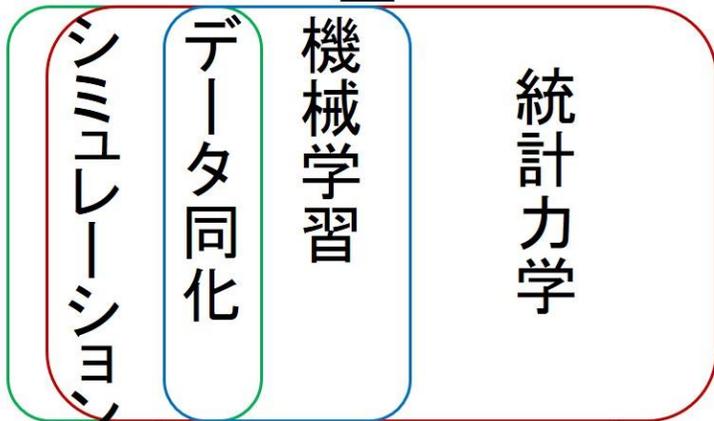
PI: 青西 亨 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科 教授)

主な研究参加者: 俣田直也 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科 助教)

データ駆動科学の異分野横展開

高次機能・設計指針 マクロ・メゾ 低次元

データ
駆動
科学



情報
統計
力学

我々の役割

各領域の
専門家の
役割

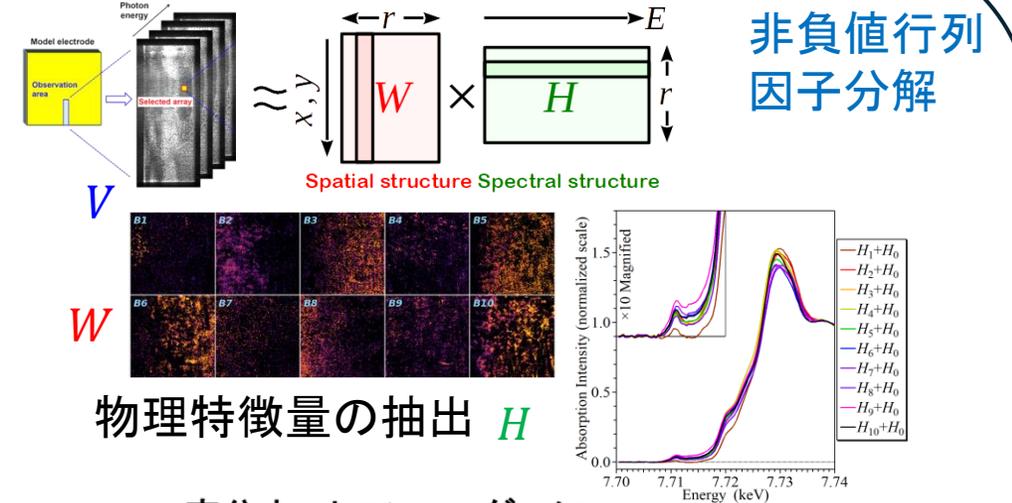
システムの同型性
モデリング

生理学
物性論
量子光学

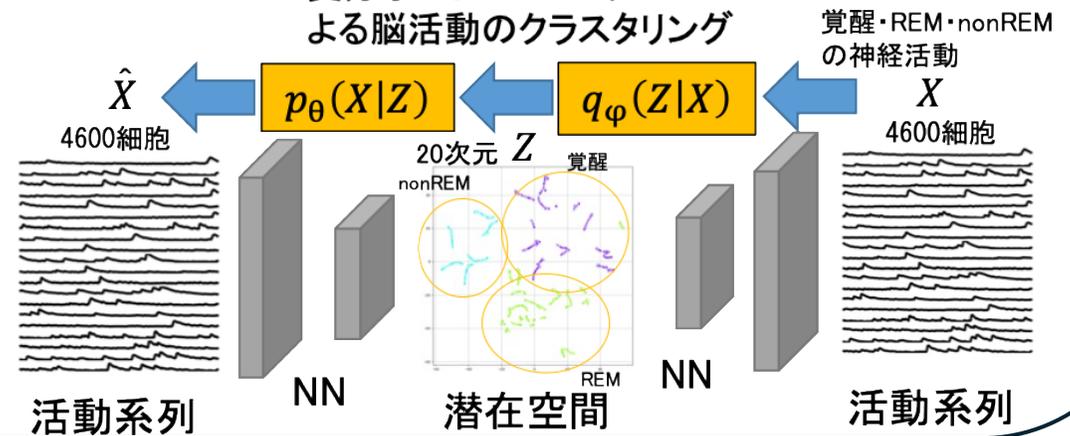


ミクロ
超高次元

リチウムイオン電池



変分オートエンコーダーによる脳活動のクラスタリング



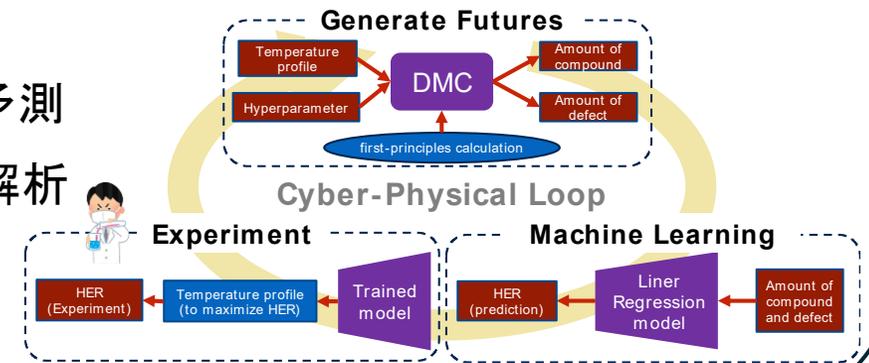
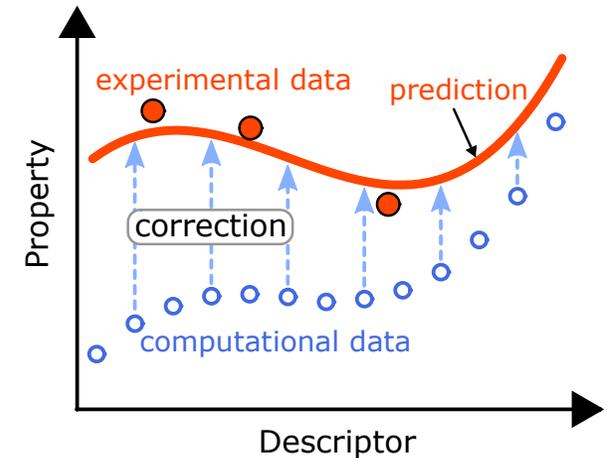


研究開発項目1-4 マテリアルインフォマティクスを中心としたAI/データ駆動科学 応用手法の構築と有用性

PI: 原嶋庸介 (奈良先端科学技術大学院大学 准教授; 2025年度よりNIFS客員准教授)

これまでの研究内容:

- マテリアルズ・インフォマティクス的手法・ソフトウェア開発
物質科学におけるデータ同化手法の提案
<https://github.com/yy-harashima/CLAUDE>
- 計算物質科学分野(電子状態計算)などの手法・ソフトウェア開発
密度汎関数理論に基づく電子状態計算プログラムの開発
- 不純物半導体における金属絶縁体転移の臨界指数の解析
- 永久磁石化合物の電子状態計算とデータ同化を用いた有限温度磁化予測
- パワー半導体の伝導特性およびゲート絶縁膜化合物の構造安定性の解析
- 光触媒化合物の焼成プロセスインフォマティクス





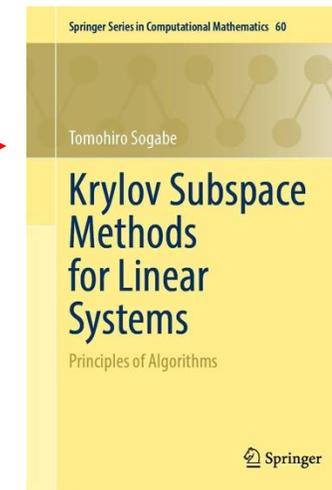
研究開発項目1-5 数値線形代数の大規模問題を中心とした 数理応用手法の構築と有用性実証

PI: 曾我部知広 (名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻 准教授)

これまでの研究内容:

- **大規模線形方程式** $Ax = b$ の解法開発 [著書: Sogabe, Springer, 2023]

クリロフ部分空間法 → 富士通ライブラリに採用(富岳、東大などのスパコンで採用)
 シフト型クリロフ部分空間法 → 東大物性研・ソフトウェア高度化 $K\omega$
 ▶ 星PM、川島PIと連携



- **大規模固有値問題** $Ax = \lambda b$ の解法開発

指定番目の固有値問題の解法開発 ▶ 星PMと連携 [Lee, Hoshi et al., J. Comput. Phys., 2018]

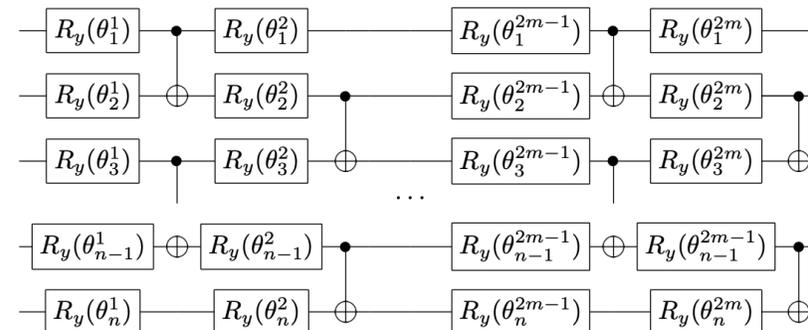
- **行列関数** $f(A)$ の解法開発 (例: A^α 、 $\log A$ 、 e^A)

→ 科研基盤(S)(2025-, 代表)(分担: 星PM、宮武PIら)

- **量子アルゴリズム** の開発

数値線形代数問題を解くための
変分量子アルゴリズム

科研挑戦的研究(開拓)(-2024, 代表)、
NEDO量子AI (2024-, 分担)、著書執筆中(共立出版)



[Sugaya, Sogabe et al., to appear in
Quantum Information and Computation, 2025]



研究開発項目1-6 革新的偏微分方程式数値解法を中心とした数理応用手法の構築と有用性実証

PI: 宮武勇登 (大阪大学 D3センター 准教授)

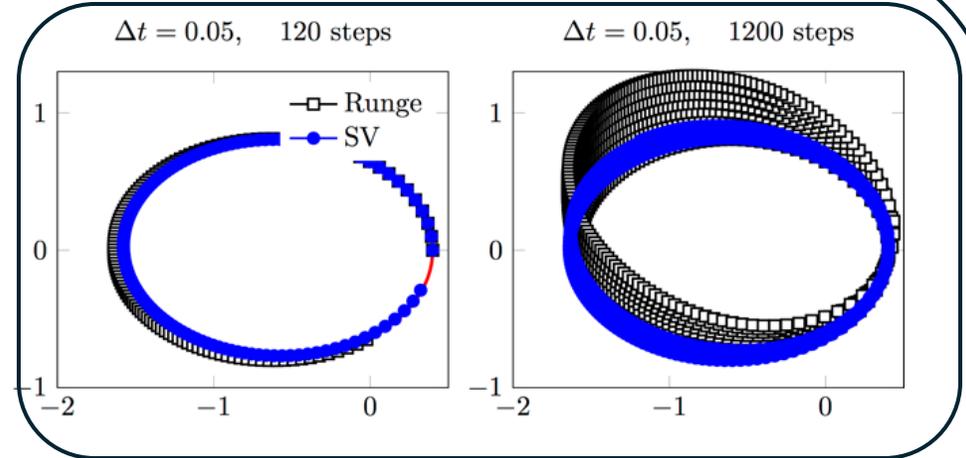
これまでの研究内容:

微分方程式に対する構造保存数値解法

→ 初等的例 (ケプラー問題)

高速・高精度なエネルギー保存解法などを多数開発
(微分方程式の離散化だけで10~100倍程度の高速化)

→ 受賞: John Butcher Prize (2013)、
文部科学大臣表彰「若手科学者賞」(2025)



計算の不確かさ定量化

数値計算の信頼性を定量的に評価する数値解析的かつ統計的手法の開発 (→ 計算最適化)

逆問題・データ同化(微分方程式のパラメータ推定)などへの応用 (ライブラリ整備)

基盤研究B(2024-2028、代表、データ同化と地震学への応用)

著書: 宮武、佐藤「微分方程式の数値解析とデータサイエンス」、サイエンス社(2025)

国際研究集会「Synergies of Machine Learning and Numerics」を開催(2025)





研究開発項目1-7 Vラボ向け高速計算技術の開発

PI: 工藤周平 (電気通信大学大学 大学院情報理工学研究科 助教)

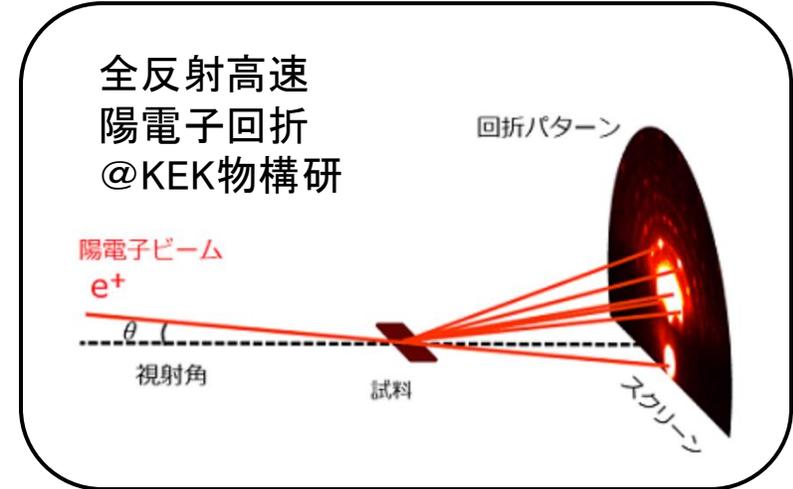
主な研究参加者: 山本有作 (電気通信大学 大学院情報理工学研究科 教授)

これまでの研究内容:

- **スパコン「富岳」ベンチマーク HPL-MxP 世界1位記録**の取得(2019) → 富岳
世界初の ExaFlops (= 1秒間に100京回の演算) 数値計算の実現
ベンチマークルールに則した新たな混合精度計算アルゴリズムの構築



- 二次元物質表面回折シミュレーションの高速化(星PMらと) → 当該実験
理論&実装両面での再構築により、1,000倍以上の高速化
ただの近似ではなく、**数値計算アルゴリズムとして理解し、再設計**



- 行列計算アルゴリズムの実装・高速化
通信削減型
GPU向け高速化 → GPUの例



研究参加者一覧(2025年6月1日現在)

・星PIグループ(NIFS)

星健夫(教授)、境健太郎(助教)、
小西優祐、Kang ByungJun(特任研究員)、中野陽斗(RA、総研大D1)

・川島PIグループ(東大物性研)

川島直輝(教授)、吉見一慶(PASUMUSプロジェクトマネージャー)、
青山 龍美(特任研究員)、本山 裕一(技術専門職員)

・青西PIグループ(東大新領域)

青西亨(教授)、俣田直也(助教)

・原嶋PIグループ(奈良先端大)

原嶋庸介(准教授)、藤井幹也(教授)、岡田拓巳(特任研究員)

・曾我部PIグループ(名古屋大)

曾我部知広(准教授)

・宮武PIグループ(阪大)

宮武勇登(准教授)

・工藤PIグループ(電通大)

工藤周平(助教)、山本有作(教授)