

2018年第79回応用物理学会秋季学術講演会
プラズマエレクトロニクス分科会シンポジウム 報告書
「プラズマ・インフォマティクス～
ビッグデータ解析の活用によるプラズマ科学の発展」

近年、ビッグデータ解析の活用による物理学の解明や物質材料開発へのアプローチが盛んに行われている。そのための学術的アプローチとしては、プラズマ科学の知識に基づき、最新の「データ科学」の成果と高速計算技術を活用することが不可欠である。本シンポジウムは、プラズマ研究で得られる巨大データから現象の物理機構を効率的に抽出する手法や、各種センサーから得られるデータをもとにプラズマ装置を効率的に制御する手法等の可能性について議論することを目的に企画された。

シンポジウムのオープニングとして、大阪大学・浜口智志先生より「本シンポジウムのねらい」の題目で本シンポジウムの趣旨、及び本シンポジウムにおける各講演者がプログラムに基づき紹介された。

続いて、基調講演として東京大学・福島孝治先生より「データ駆動科学の物質科学への展開」の題目で講演頂いた。機械学習の目的の一つである「予測」を、「シミュレーション」や「実験」の解析手法としてデータ科学の手法を取り入れることとの質的な違いがどこにあるのかについて言及された。実験データから情報を抽出し、次の実験計画に指針を与えたり、あるべき理論に条件を提示するといった予測よりも理解を重視した考え方として「データ駆動科学」がいう概念が提案された。講演では、データ駆動科学の実践例としてSTMの2次元測定画像から抽出された薄膜表面情報の解析について示された。この概念を成熟させるとともに、分野に依らない普遍的な方法論が見いだせるかどうかは今後の研究の展開を見定める必要があるとのことであった。

続いて、招待講演として核融合研・村上泉先生より「原子分子データベースとデータ評価」の題目で講演頂いた。分光診断やプラズマモデリングにおいて、例えば高Z元素の多価イオンは1万以上のエネルギーレベル間の電子衝突励起レートとなるために原子過程の数がかなり多くなることや、多数の発光線が重なり合った構造を形成するので、データ評価が困難であった。このような発光線構造を持つイオンの分光モデルや原子データを評価するための統計的な手法を用いた取り組みについて、電子衝突励起速度係数などの原子分子データベースの整備状況とともに紹介された。

続いて、招待講演として物材機構・木野日織先生より「マテリアルズ・インフォマティクスにおける記述問題、予測問題、提案問題」の題目で講演頂いた。記述問題として、キューリー温度の予測能を上げるために必要な記述子に関する研究、予測問題として第一原理計算によるポテンシャルエネルギー表面を原子の種類と配置のみならず、データ空間を分割することにより回帰性能を上げた研究、提案問題としてベイズ最適化を用いて第一原

理計算による構造探索を自動化し、少ない探索試行回数で安定な構造を発見した研究について紹介された。また、あるプロジェクト遂行において、専門用語を平易な形で取り出すばやく意思疎通を図るための手法として、機能オントロジに基づく分解木が紹介された。

一般講演として愛媛大・吉武氏より「プラズマ遺伝子導入におけるプラズマ照射条件のインフォマティックス的最適化」という題目で講演された。プラズマ遺伝子導入法において、細胞の大きさや、核の大きさなどの物理的な指標のみで評価するよりも、細胞の生物学的な特性である倍加時間を要素として考慮した方がプラズマ照射最適条件の予測に有効であると報告された。

続いて、招待講演として日立製作所・大森健史先生より「プラズマエッチング形状最適化への機械学習応用」の題目で、機械学習を利用してエッチング形状を予測しプロセス条件の最適化を行う手法について講演を頂いた。具体的には、初期学習用データとしてレシピパラメータを7項目80条件と設定し、SEM像によるトレンチの幅および深さ等の9項目を特徴量とした形状予測モデルを構築した。本モデルからレシピを予測し、実際にエッチングを行ったところ、垂直なSiトレンチ形状を得ることができたとのことであった。また、エッチング形状の最適化に必要な機械学習モデルの特性なども述べられた。

続いて、招待講演として核融合研・横山雅之先生より「大規模輸送解析データベースと統計手法に基づく核融合プラズマの熱輸送モデリング」の題目で講演頂いた。多数の実験や熱輸送解析結果をデータベースとした統計的手法により、衝突や乱流起因などの熱輸送区分や、揺動の種類などに依らない、広範囲のプラズマパラメータにわたって有効なモデリングを提示することを目指しているとのことであった。現状で、およそ3000のイオン熱輸送係数解析データベースを構築できたということであった。

最後にまとめとして、データ駆動型科学の将来を展望した。プラズマ科学では非平衡、非線形現象の複雑さもあって簡単ではないが、ビッグデータ解析の活用が成熟するにつれ、この手法そのものは学術的にも産業的にも普遍的になっていくであろうとまとめられた。

本シンポジウムでは、上述の1件の基調講演、5件の招待講演、1件の一般講演において、プラズマ・材料・プロセスとデータ駆動科学・機械学習・データベースに関する最新の結果が紹介され、各発表に対して活発な議論が交わされた。また、分野からも合計150名以上の多くの参加者がみられ、盛況なシンポジウムとなった。

最後に、シンポジウムで講師を頂きました先生方、活発な議論をして頂きました参加者の皆様、シンポジウムの開催にご協力を頂きました分科会幹事の皆様に、深い感謝の意を表します。

世話人：太田貴之(名城大)、古閑一憲(九大)、酒井道(滋賀県立大)、浜口智志(阪大)