

数理・情報のフロンティア
2019 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書

坂田 逸志

東京大学 大学院理学系研究科
大学院生(博士課程)

スパース動的モード分解による効率的な触媒設計手法の開発

§ 1. 研究成果の概要

前年度は反応を起こさない系に対して手法の有効性を検証した。今年度は、反応を起こす対象に対して分子構造の変化を抽出することを目指して研究を行った。具体的には MgO 触媒下でメタン分子の水素原子が乖離する反応を対象に研究を進めた。動的モード分解は背後の物理的構造変化を直接抽出することは難しいので、データから定常的にみなせる部分を抽出することを試みた。具体的

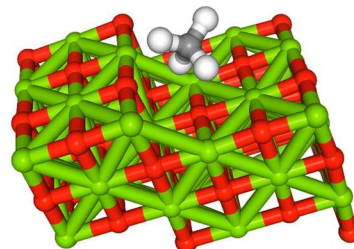


図 1 MgO 触媒下でのメタンの運動

には MD の4次元時系列データの主成分分解を行ったところ、アトラクター構造の抽出に成功した。次に切り出したデータに対して、反応のしない場合と同じ解析を試みた。DMD によって抽出された基底数はより増大したため、背景の構造の抽出は難しくなった。抽出されたモードを各々詳しく解析したところ、構造変化に対応するようなモード自体は抽出されていることが判明した。このようなモードを主要な成分として抽出するため、動的モード分解の拡張を行った。動的モード分解は実データ解析において、ランダムな揺らぎのあるようなデータに対してモードが広く分散してしまう問題がある。今回の解析の問題は、分子運動の揺らぎに由来するものだと考えられる。この問題を解決するため、周波数や位相の変化をある程度吸収する手法として動的時間伸縮法(Dynamic Time Warping, DTW)を動的モード分解に導入することを試みた。動的モード分解は抽出したモードの係数の推定を最小二乗法によって行っているが、これを DTW に置き換えることを考える。DTW は微分できないのでパラメータ最適化に用いるのは難しいが、近年微分可能な拡張として Soft-DTW [Mathieu Blondel et al. 2017]が提案されている。DMD にこの Soft-DTW を導入した手法を用いて、重要な少数なモードを抽出できるかどうかを検証中である。