

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

平成 29 年度採択研究者

2018 年度 実績報告書

五十嵐 康彦

科学技術振興機構

さきがけ研究者

スパースモデリングによる物質・材料設計のための基盤技術の構築

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、マテリアルズインフォマティクスの推進のために、スパースモデリング (SpM) による記述子抽出の基盤技術を確立するとともに、この基礎技術を計測科学と計算科学において展開を行っている。平成 30 年度では、図 1 に示すように、計算科学、計測科学から得られるデータから効率的に本質的な情報を抽出することで、クラスターモデルにおける配位エネルギーの記述子抽出[Sodeyama, Igarashi et al., PCCP, 2018]や高収率なナノシート合成[Nakada, Igarashi, Imai, Oaki., Adv. Theory Sim., 2019]といった物質材料設計に資する手がかりの獲得し、物質・材料設計の指針となる新たな手法を構築した。

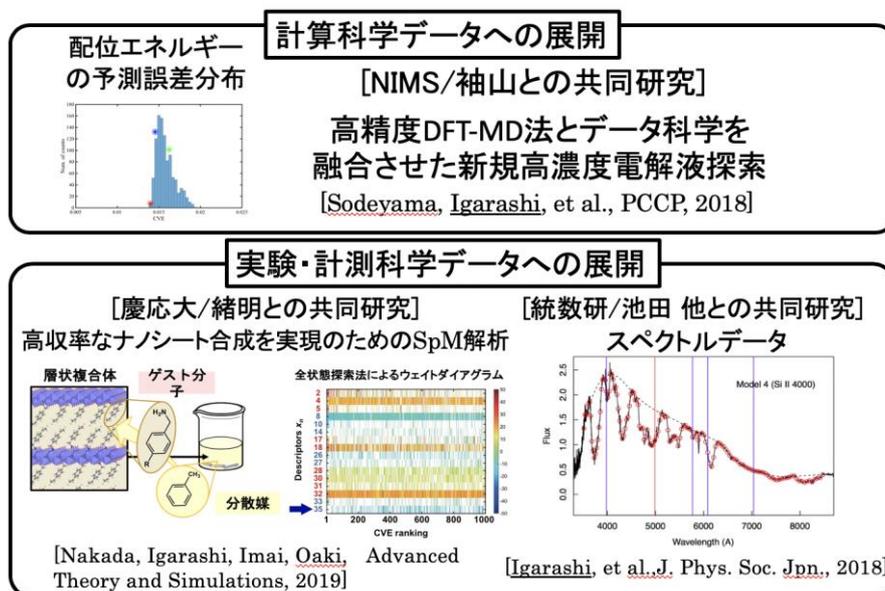


図 1. スパースモデリングのマテリアルズインフォマティクスへの展開

§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 五十嵐 康彦 (科学技術振興機構 さきがけ研究者)
- ② 研究項目

【課題 1】情報科学: SpM による記述子抽出法の確立

情報科学的観点から、記述子抽出のための基盤技術として、近似的な全状態探索を行う枠組みを構築する。

【課題 2】計測科学: SpM による計測性能向上と連続スペクトルからの記述子抽出

新物質・材料において、材料組織や複雑な界面など計測結果を近似式や現象論的方程式だけでは取り扱えない系であることが多い。このような SpM が有効と想定されるため、【課題 1】の SpM 手法を用いて新物質・材料設計に必要な計測手法の性能向上を目指す。

【課題 3】計算科学: SpM による時空間データの少数モード展開

計算科学の時空間データ解析を視野にいれ、流体分野における Sparse-Dynamical Mode Decomposition (SpDMD) の研究を調査し、時空間データの少数モード展開を検討する。