

五十嵐 康彦

筑波大学システム情報系  
准教授

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。2019年度では、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ため、SpMを適用した。近年のレーザー技術の進歩によって、パルス幅がフェムト秒オーダーの超短光パルスを、様々な物性とそのダイナミクス(時間変化)の計測に利用できるようになった。このパルス信号から、計測データ中のノイズを推定しながらSpMによって少数の重要な振動モードを抽出することで、振動の振動数や初期位相等の物質の固有振動モードの物性情報を抽出した[Sakata et al., 2020]。さらに、慶應大の緒明らと共同して、実験データへのSpMを推進した。具体的には、リチウムイオン二次電池を対象にした有機高分子負極の予測モデルを構築し、その予測モデルによって新規化合物を探索に繋げた[Numazawa et al., 2019]。

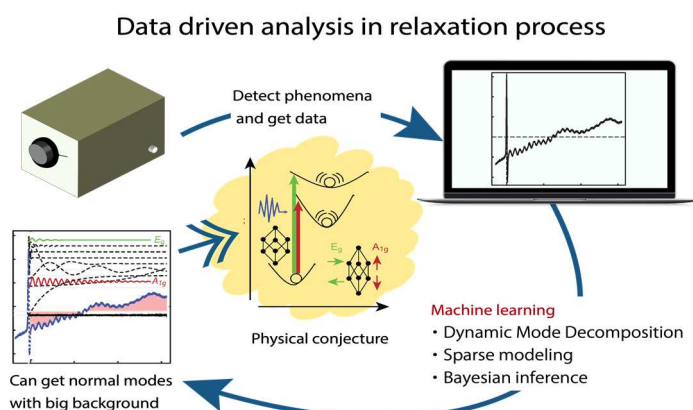


図 1. コヒーレントフォノン計測