

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

五十嵐 康彦（筑波大学大学院システム情報工学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

情報科学をバックグラウンドとする五十嵐研究者は、情報科学的観点からマテリアルズインフォマティクスを推進するために、様々な基盤技術を構築した。とくにスパースモデリング (SpM) による記述子抽出のための「全状態探索法」を構築したことで、機械学習で用いられる記述子自体の評価が可能になり、特徴量を計算（実験）するコストと求めたい機能の予測精度のバランスを考えた材料探索が可能になった。そのほか、計測科学への展開として、事前知識を使わず測定データのみから原子周辺の構造と原子の構造ゆらぎを解析できる手法や、超高速分光により測定された計測データから SpM により重要なモードを抽出する手法など、物質・材料研究の様々な局面で有用な手法を開発した。

五十嵐研究者はこれら手法をもとに本研究領域内外の複数の研究者と共同研究を行い、それがたとえば2期生の緒明佑哉研究者との共同研究により高収率なナノシート合成や世界最高水準のリチウム電池負極用有機材料の発見に貢献するといった顕著な成果につながっている。このように、五十嵐研究者は本研究領域に参加して材料科学に関する自らの知見を深めつつ、材料科学研究者のニーズによく応えて、日本のマテリアルズインフォマティクスのレベル向上に貢献しており、高く評価したい。