

天文学的探索空間を切り拓く大規模理論計算とデータ駆動型材料探索

理論計算・計算材料科学を専門としており、特に「巨大な探索空間を、現実的な時間スケールで解き切る」ためのアルゴリズム開発に取り組んでいます。

材料科学における本質的な困難の一つは、組成・サイト配置・相互作用・非線形応答などが組み合わさることで、探索空間が指数関数的に巨大化する点にあります。このような天文学的スケールの問題に対し、並列計算・独自アルゴリズム・データ駆動型探索戦略を融合したスケーラブル計算手法を構築してきました。

特に、

- 超大規模量子摂動計算フレームワーク「SQPertation」
- 固溶体におけるサイト配置問題を高速に扱う「EwaldSolidSolution」
- 複雑な相互作用や非線形応答を記号回帰によって探索する「GoodRegressor」

などの独自プログラム群を開発し、材料化学・エネルギー材料・複雑系物質の研究に応用しています。

これらの研究では、単なる既存ツールの適用に留まらず、物理法則・数理構造・計算科学に根差した新しい計算手法そのものの構築を志向しています。特に、巨大探索空間に対する効率的サンプリング、非自明なパターン抽出、物理的に解釈可能なモデル構築に強みを有しています。

また、研究用ソフトウェア・高性能計算コードの設計・実装も自ら行っており、理論・アルゴリズム・実装・応用を一貫して推進できる点も特徴です。

キーワード

- データ駆動科学
- 計算材料科学
- 大規模並列計算
- 記号回帰
- 高性能計算（HPC）
- アルゴリズム開発
- 第一原理計算
- 組合せ最適化
- 複雑系探索
- スケーラブルシミュレーション
- 固溶体・無秩序系
- データ駆動科学

技術的強み

■ 超巨大探索空間へのアプローチ

指数関数的に増大する配置・構造・状態空間に対し、独自アルゴリズムと並列化戦略を用いて実用的計算を可能にします。

■ 物理とデータ駆動科学の融合

ブラックボックス的予測だけでなく、物理的解釈可能性を重視した AI・記号回帰・モデル探索を行います。

■ 研究ソフトウェア開発

研究目的に応じた独自コード・ワークフロー・高速化技術を設計・実装し、大規模科学計算へ展開しています。

■ データ駆動型科学への展開

材料探索、非線形応答解析、複雑相互作用系、未知構造探索などに対し、AI 駆動型科学研究を推進しています。

Large-Scale Computational Materials Science for Astronomical Search Spaces

My research focuses on theoretical and computational materials science, particularly on developing scalable algorithms capable of navigating enormous search spaces within realistic computational times.

One of the central challenges in modern materials science is the exponential growth of configurational and interaction spaces arising from compositional complexity, site disorder, nonlinear responses, and many-body interactions. To address such astronomically large problems, I develop computational frameworks that integrate massively parallel computing, original algorithm design, and data-driven search strategies.

Representative projects include:

- “SQPertation”: a large-scale quantum perturbation framework
- “EwaldSolidSolution”: a scalable solver for configurational problems in solid solutions
- “GoodRegressor”: a symbolic-regression-based framework for discovering complex nonlinear relationships and hidden interactions

These developments are applied to advanced problems in materials chemistry, energy materials, and complex condensed-matter systems.

Rather than merely applying existing computational tools, my research focuses on developing new computational methodologies rooted in physical principles, mathematical structures, and computational science. My particular strengths include efficient exploration of enormous search spaces, extraction of nontrivial patterns, and construction of physically interpretable models.

Another important aspect of my work is the direct development of scientific software and high-performance computational codes. This enables seamless integration of theory, algorithms, implementation, and scientific applications.

Keywords

- Data-Driven Computational Science
- Computational Materials Science
- High-Performance Computing (HPC)
- Symbolic Regression
- Scalable Algorithms
- Parallel Computing
- First-Principles Calculations

- Combinatorial Optimization
- Complex Systems
- Data-Driven Science
- Disordered Materials
- Scientific Software Development

Core Strengths

■ Scalable Exploration of Massive Search Spaces

Development of original algorithms and parallel strategies for exponentially large configurational and structural spaces.

■ Integration of Physics and AI

Data-driven methodologies emphasizing physical interpretability rather than purely black-box prediction.

■ Scientific Software Engineering

Design and implementation of high-performance scientific software tailored to advanced computational research.

■ Data Science Applications

Data-driven approaches for materials discovery, nonlinear response analysis, complex interaction systems, and unknown structure exploration.