

「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」
2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書

池野 豪一

大阪府立大学大学院工学研究科
准教授

機械学習と第一原理計算による新規スペクトル解析技術の確立

§ 1. 研究成果の概要

X線吸収分光から物質中の特定の元素周辺の局所原子構造や化学状態を反映したスペクトルが得られる。従来、これらのスペクトルの解析には量子論に基づく電子状態計算が用いられるが、大量のスペクトルを解析するには、その計算コストの大きさが問題であった。本研究では、機械学習を用いて、X線吸収スペクトルを迅速に解析する手法の開発を行っている。2018年度は、第一原理計算データベース(Materials Project)から酸素を含む物質の酸素 K 端の理論スペクトルを収集し、物質の原子構造からスペクトルを直接予測する機械学習モデルの作成を試みた。複数の学習法を試みたところ、多層ニューラルネットワークが最も良い予測精度を示し(図 1)、第一原理計算なしにスペクトルのおおまかな特徴を捉えた予測が可能であるという知見を得た。

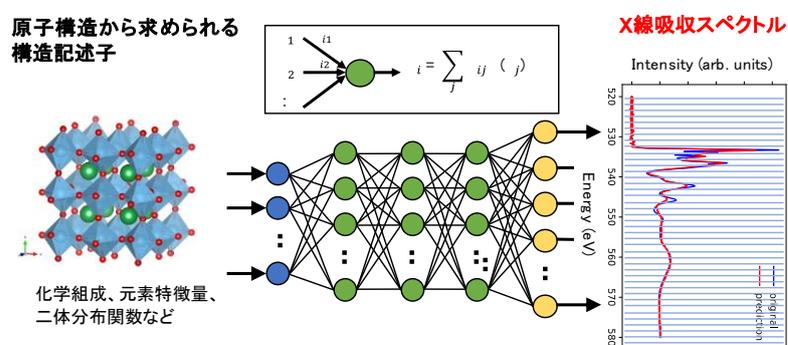


図 1. X線吸収スペクトルのニューラルネットワークモデルの概念図

§ 2. 研究実施体制

①研究者:池野 豪一 (大阪府立大学工学研究科 准教授)

②研究項目

- ・X線吸収スペクトルデータベースの構築
- ・X線吸収スペクトルの機械学習モデルの作成
- ・スペクトルの定量照合法の開発