

Materials Informaticsを活用した材料探索

大阪大学大学院工学研究科 谷川智子・齋藤健・槻尾大輔・北野祥平

目的 新規ポリマー化合物の光学特性を予測するモデルの構築

内容 社内で蓄積されていた実験結果をまとめたデータベースを学習データとし、任意の新規組成の光学特性を予測する機械学習モデルを構築した。ここで別途作成した数億通りの仮想組成を読み込ませ、目的の物性を満たすと予測された組成の抽出を行った。

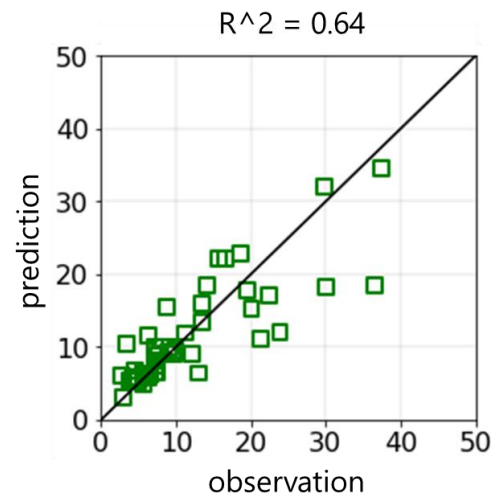
結果 $R^2=0.64$ の予測モデルを構築でき、これにより新規ポリマー処方の光学特性をある程度予測することができるようになった。

利用した計算機

ノード時間
並列化

OCTOPUS

550時間
なし



図：構築したモデルの精度（予測値 vs 実測値）