

# MIへの適用を目指した量子化学計算

大阪大学大学院工学研究科日本触媒協働研究所

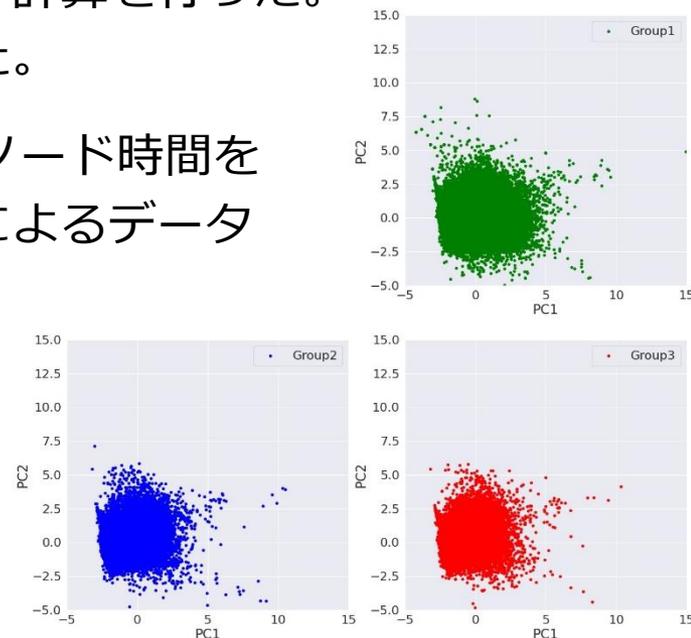
山本 啓太, 吉安 勇人, 本村 肇, 木下 竣登

**目的** 機械学習を用いて材料開発を行うマテリアルズ・インフォマティクス(MI)においてデータの質と量が重要となる。量子化学計算を利用したMIについて検討を行った。

**内容** 試薬ベンダー3社のHP上に記載されている構造情報を元に Gaussian16を用いて構造最適化、エネルギー計算を行った。得られたデータを用いて主成分分析を行った。

**結果** 約20万件の構造最適化計算におおよそ10万ノード時間を消費した。データ分析の結果ベンダーごとによるデータの違いは見られなかった。

利用した計算機	SQUID CPU
ノード時間	104000時間
使用メモリ	250GB
ソフトウェア	Gaussian16.C.01
並列化	76並列



図：主成分分析結果