

格子欠陥特性の高精度予測に向けた機械学習記述子の構築

名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻 横井達矢、松永克志

目的 機械学習記述子の構築に向けたDFT学習・テストデータの収集

内容 Siを対象として、点欠陥や表面、粒界を含む計算セルをリファレンスとしてDFT計算を実行した。

結果 機械学習記述子の学習に必要な系の全エネルギー、原子にかかる力、応力に関して十分なDFTデータを得ることができた。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	336 時間
使用メモリ	50 GB
並列化	1ノード 並列

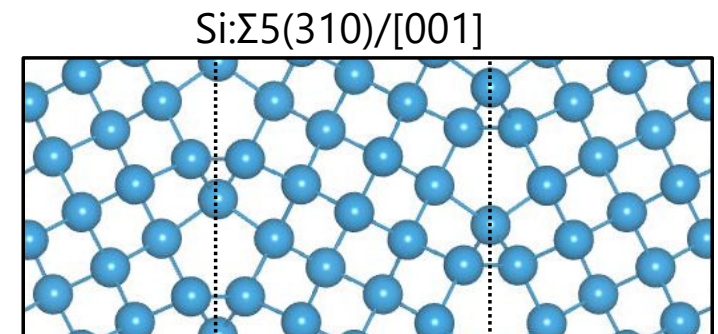


図 収集した粒界構造の例