

Materials Informaticsを活用した材料探索

大阪大学大学院工学研究科 狩野源太・槻尾大輔・谷川智子・齋藤健

目的 新規無機化合物の化学的安定性を見積もるためのモデルを構築すること。

内容 Materials Projectデータベースから15万件のデータをダウンロードし、深層学習により任意の組成の1原子あたりのエネルギーを予測するモデルを構築した。

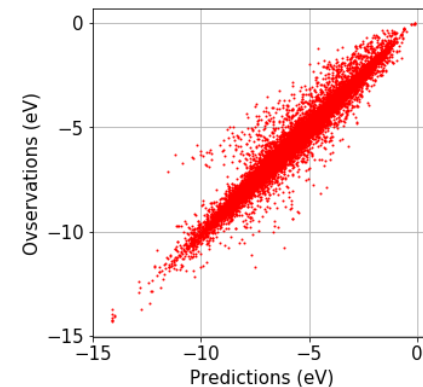
結果 平均絶対誤差が0.19eVのモデルを構築できた。これにより新規化合物の化学的安定性をある程度予測することができるようになった。

利用した計算機

ノード時間
並列化

OCTOPUS

280時間
なし



図：構築したモデルの精度
(予測値 vs 実測値)