

Materials Informaticsを活用した材料探索

大阪大学大学院工学研究科 北野祥平・齋藤健・槻尾大輔・谷川智子

目的 高分子材料に関する予測モデルの構築および逆解析

内容 高分子材料に関する in-house の実験データを用いて、材料組成から複数の物性を予測する機械学習モデルの構築を行った。
この予測モデルを用いて数千万通りの仮想組成について逆解析を行い、所望の物性を同時に満たす材料組成の探索を行った。

結果 各物性ともに $R^2 = 0.8$ 程度と精度の良い予測モデルが得られた。
逆解析では、複数の物性を同時に満たすような組成の可視化につながった。

利用した計算機

ノード時間

使用メモリ

ソフトウェア

並列化

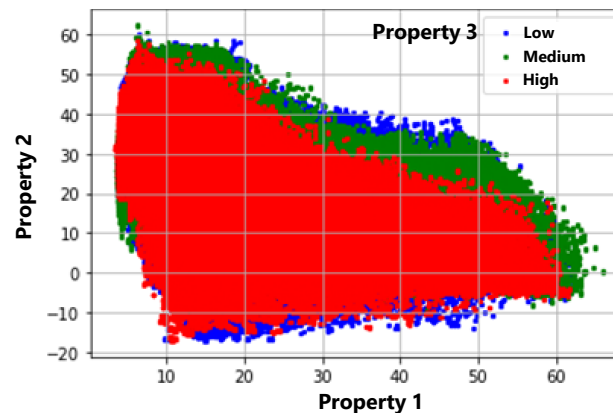
OCTOPUS

23815時間

190GB

Anaconda

なし



図：仮想組成の物性値（予測値）のプロット