

結晶構造予測手法のベンチマーク

パナソニックホールディングス株式会社 テクノロジー本部 横山智康

目的 予測精度の観点から構造予測手法のベンチマークを行う

内容 Materials Projectより選択した40化合物の組成に対し、新たに開発した手法を用いて構造予測を実施

結果 本手法による正解率は45%であり、昨年度の従来手法の正解率6%より大幅に改善した。特に原子数の多い構造の正解率が向上しており、本手法の優位性を証明することができた。

(a)

(b)

利用した計算機

ノード時間

使用ストレージ

グループ番号

OCTOPUS

57227時間

10TB

I2202

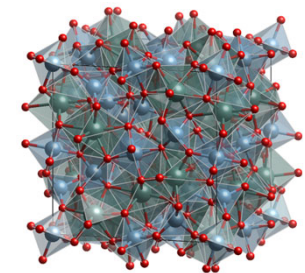
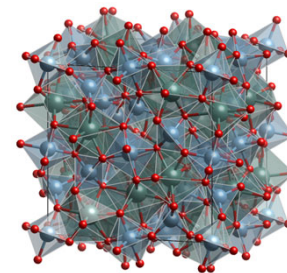


図 Y3Al5O12の(a)正解構造と(b)予測構造