

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアル
ズインフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書

熊谷 悠

京都大学工学研究科材料工学専攻

特定准教授

半導体材料開発のための計算データベース構築

§ 1. 研究成果の概要

本年度は、計算材料データベース構築に必要な、第一原理計算自動化システムの開発を行なった。大規模な第一原理計算を実行した際のエラーに対する対処や計算機の管理など、人が手動で行っていた部分を完全自動化することで、大幅に人的コストを削減することが可能となった。その応用例として、数千の酸化物を対象に網羅的な第一原理計算を実行し、5,000 以上の酸化物の誘電定数と、2,000 以上の酸素空孔形成エネルギーの計算を行った。また得られた結果に対して機械学習のランダムフォレストを用いて、それぞれの値を予測するための回帰式の構築を行なった。

図に結果の一例として、機械学習による酸素空孔形成エネルギーの回帰の結果を示す。我々が構築したモデルでは、テストセットにおいても第一原理計算で得られる酸素空孔形成エネルギーを 0.3 eV 以下の精度で予測することが可能となる。

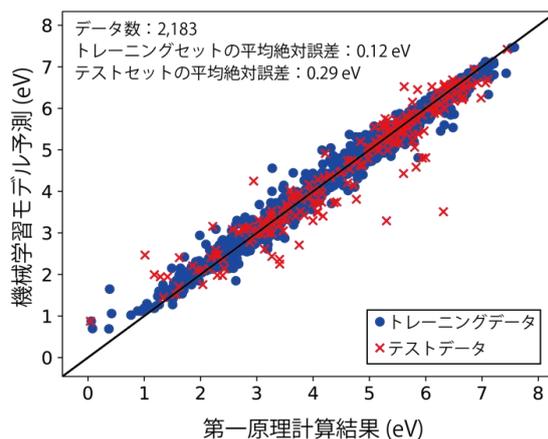


図 4. 機械学習による酸素空孔形成エネルギーの予測

§ 2. 研究実施体制

①研究者：熊谷 悠（京都大学工学研究科材料工学専攻 特定准教授）

②研究項目

- ・ 本研究の全ての主たる研究者