

研究題目： マテリアルズプロジェクトのデータと **CGCNN** を用いた先進材料分析の統合

学生氏名： 電気工学科 5 年

ハッシーンモハメッド

指導教員： 電気工学科

山田 悟 研究室

1. はじめに

材料科学はエネルギー、エレクトロニクス、環境保護など多くの分野で重要な役割を果たしている。しかし、従来の実験ベースのアプローチは時間とコストがかかるため、新しいアプローチが求められている。**CGCNN** は、結晶材料の特性を予測するための機械学習モデルであり、結晶格子構造をグラフとして扱い、その特性を学習することで革新的な材料探索の可能性を秘めている。

2. 研究概要

本研究では、Materials Project データベースを活用し、**CGCNN** (Crystal Graph Convolutional Neural Networks) を用いて材料特性の予測精度を向上させる手法を開発している。Materials Project データベースは、豊富な結晶構造と物性データを提供するものであり、機械学習モデルのトレーニングに非常に有用である。**CGCNN** は、結晶構造をグラフとして表現し、その構造から直接的に材料の特性を学習できるモデルである。このため、従来の機械学習モデルのように手動で特徴を設計する必要がなく、効率的である。従来の実験的アプローチと比較して、この手法は時間とコストを大幅に削減でき、効率的かつ革新的な材料探索の実現が期待される。

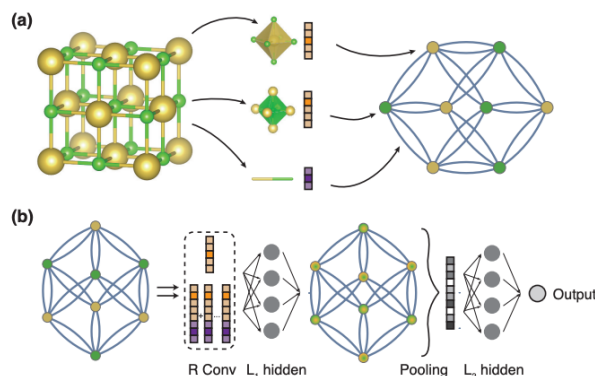


図 1 Illustration of the crystal graph convolutional neural network (CGCNN).

3. 進行状況

現在、ユーザーからの入力に基づいて Materials Project からの生データをダウンロードする部分は完了している。次のステップとして、生データを **CGCNN** モデルに適した形式に変換する作業を行っており、これが完了次第、モデルのトレーニングと実際の例を使ったテストを実施する予定である。

4. 今後の予定

データの変換を終えた後、**CGCNN** モデルのトレーニングに進み、実際の例に基づく検証を行う。また、十分な時間が確保できれば、逆方向の設計手法にも挑戦し、目標とする材料特性を入力として与えた際に、それを達成する可能性のある元素や材料を提案するモデルの構築を目指す。この逆方向のアプローチが実現すれば、新材料設計のさらなる効率化が期待される。

【参考文献】

- [1] Tian Xie, Jeffrey C. Grossman : 「Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an Accurate and Interpretable Prediction of Material Properties」
- [2] 阿慈地 惇人, 西山 勝彦, 山田 悟「CGCNN を用いた物性値予測におけるデータセットの選択重要性」
- [3] Juhwan Noh, Geun Ho Gu, Sungwon Kim and Yousung Jung 「Machine-enabled inverse design of inorganic solid materials: promises and challenges 」