

機械学習によるバンドギャップの予測

Prediction of Band Gap using Machine Learning

伊藤忠テクノソリューションズ ◯瀬川 正仁, 森 一樹

ITOCHU Techno-Solutions Corp., ◯Masahito Segawa, Kazuki Mori

E-mail: masahito.segawa@ctc-g.co.jp

1. 緒言

材料のバンドギャップを予測する手法として、局所密度近似(LDA)や一般化勾配近似(GGA)を用いた密度汎関数法(DFT)が広く使われてきたが、実験値と比較して過小に評価してしまうことが知られている。また、バンドギャップをより精度よく計算する手法として GW 法が有効であるが、DFT と比較して膨大な計算時間が必要となる。一方で最近、物性値を予測する手法として機械学習が注目されており、物性予測の効率化が期待されている。そこで、Web ベースのデータベースとクラウド計算機を利用した機械学習によるバンドギャップ予測の有用性を検証する。

2. バンドギャップの予測

バンドギャップの計算および機械学習には、Materials Project[1]より取得した材料データを用いた。トレーニングデータに使用するバンドギャップは、第一原理ソルバーとして Quantum Espresso[2, 3]を用い、GGA により計算した。なお計算資源として、クラウド型マテリアルデザインプラットフォーム Exabyte.io[4]を使用する。体積、密度、原子の割合を特徴量として入力し、バンドギャップの回帰分析を行う。トレーニングデータを 335 個として学習し、テストデータを 20 個の予測したところ、平均二乗誤差は 0.816、決定係数は 0.699 であった。精度向上のためには、電気陰性度、イオン化エネルギーを考慮するなど特徴量の精査等が必要と考えられる。

[1] <https://materialsproject.org/>

[2] P. Giannozzi *et al.*, J.Phys.:Condens.Matter **21**, 395502 (2009)

[3] P. Giannozzi *et al.*, J.Phys.:Condens.Matter **29**, 465901 (2017)

[4] <https://exabyte.io/>