

jh190019-NAJ

川添良幸 (東北大学 未来科学技術共同研究センター)

# 全電子混合基底第一原理計算法を活用したネットワーク型エネルギー絶対値算定マテリアルインフォマティクス



## 【網羅的物質探索】

15年以上前の成功事例

「DFT計算による真空超紫外光(VUV)材料の設計・探索」

T. Nishimatsu, ..., Y. Kawazoe, Jpn. J. Appl. Phys. 41, L365 (2002).

ペロブスカイト構造を持つ直接遷移型ワイドギャップ半導体の網羅的探索

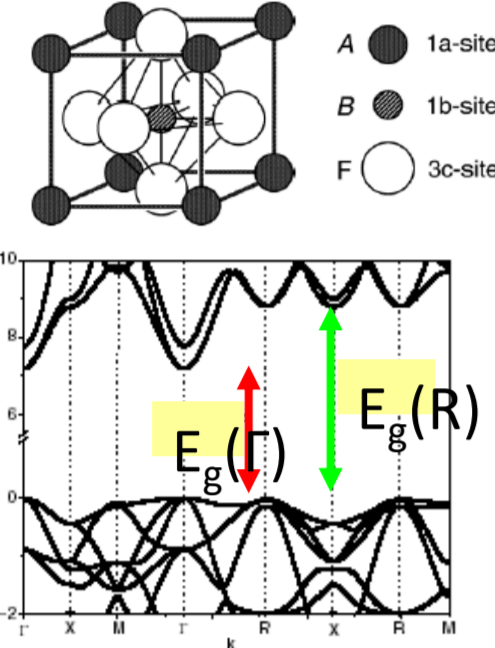


Table 1. Selected compositions for each band calculation of the perovskite-like structure of AB<sub>3</sub>. Its calculated tolerance factor, band gap type (direct or indirect), and calculated band gap width E<sub>g</sub> [eV] within the E24.

既知のLiCaAlF<sub>6</sub>以外に、Na/K/Rb/Cs/Ag等の網羅的DFT計算

新規真空超紫外光材料の発見→実験検証→実用化

計算科学による網羅的物質探索の有効性を実証！

→機械学習使えば更に探索空間広がる

## 【GW計算基盤】

全電子混合基底第一原理計算法プログラム



TOhoku Mixed-Basis Orbitals Ab initio Simulation Package

東北大・川添グループ開発

大型並列計算機状での高効率GW計算実装

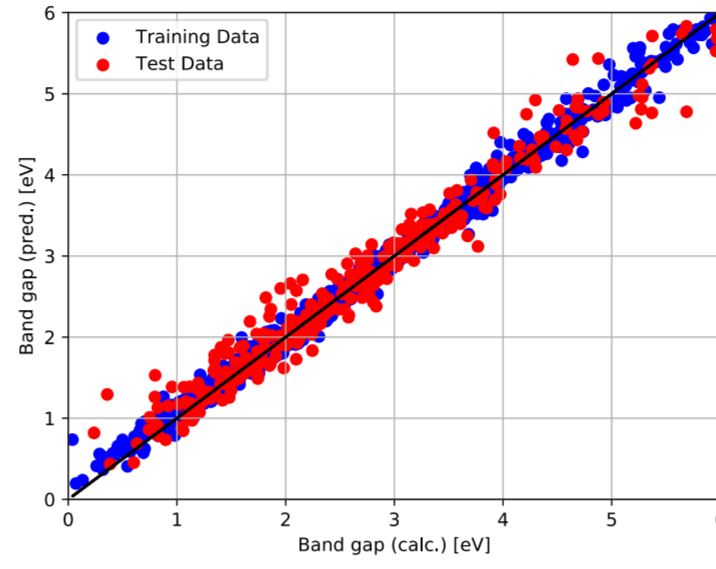
Hitachi SR1600/NEC SX-ACE/※Intel系マシンで要チューニング

全電子計算→エネルギー絶対値算定 (× 擬ポテンシャル計算)

## 【マテリアルズ・インフォマティクス/MI】

High Throughput Virtual Screening

DFTは学習データ生成、大量物性評価は機械学習



機械学習モデル選択、記述子選択等の問題あるが、

機械学習モデルの予測精度は良好

予測時間

DFT数分 vs. 機械学習1秒以下

機械学習による網羅的探索

## 【DFT/MIでVUV材料探索は可能？】

DFTは基底状態理論/発光波長算定には理論的に不適切

最低伝導帯(励起状態)と最高価電子帯のエネルギー差

DFT/バンドギャップ理論予測の問題

励起状態を正しく扱える理論が必要→「GW理論」

ダイソン方程式を解く多体電子論の枠組み→励起状態を扱える

高精度計算(GW)だと定量性担保できるが、計算コスト増大...

$$\Sigma = iGW$$

## 【解決方策は？】

GW機械学習モデル構築→Co-Kriging/転移学習

DFTデータで学習済みの機械学習モデル+少数GWデータ

## 【課題設定】

GW計算と機械学習の融合展開:

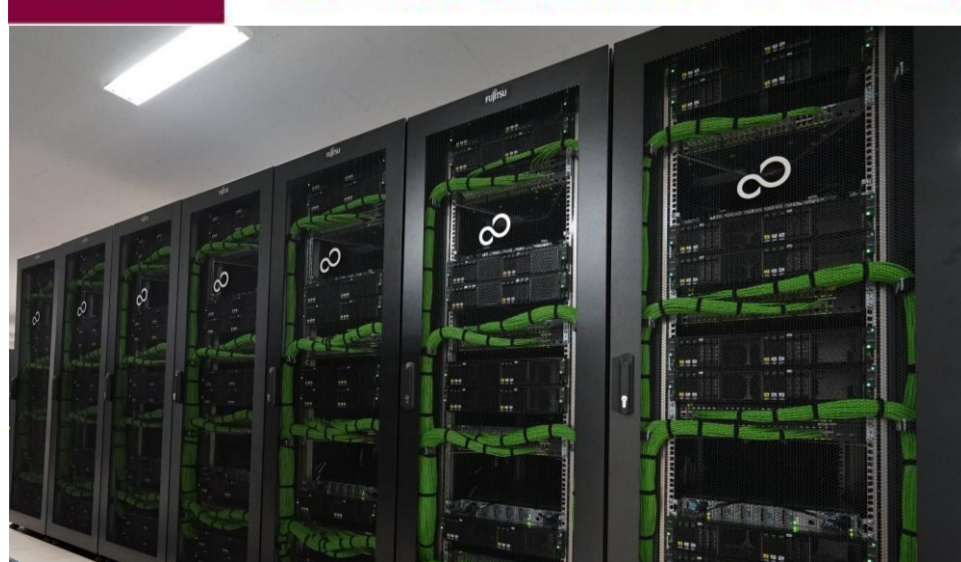
「バンドギャップ・エンジニアリング」

次世代MI研究基盤の確立

## 【研究計画・拠点連携体制】

### 九大/ITOシステム

GW計算/MI計算のデータベース構築基盤



物性物理/計算材料学研究者の協働

川添良幸/東北大

研究統括

水関博志/KIST(韓国科技院)

MIIに依る新規材料探索と公開

大野かおる/横国大

TOMBOプログラム開発

佐原亮二/NIMS(物材機構)

TOMBOプログラム実行

本郷研太/JAIST(北陸先端大)

MIプログラム作成・実行

南里豪志/九州大学

システム高度化チューニング

ネットワーク経由で  
自動化データ転送

ITO上実施のGW計算対象系  
→機械学習の学習データ生成

1. 化合物半導体系Ga<sub>1-x</sub>B<sub>x</sub>N (0 ≤ x ≤ 1)
2. 真空超紫外(VUV)光発光材料
3. 2次元層状材料  
e.g. グラフェン、h-BN、遷移金属カルコゲナイド、etc

バンドギャップ・エンジニアリング実証

- 1/DFT機械学習モデルの構築  
→転移学習・Co-Kriging利用
- 2/GW機械学習モデルの構築

TOMBO/GW計算の計算コスト

ITOシステム利用のH30年度実績

36/144並列で99.8%の並列化効率

実施予定計算:

DFT計算: 100,000ノード時間

GW計算: 14,400ノード時間

合計/200ケース: 114,400ノード時間

### JAIST/並列計算機群

MI研究基盤確立/MIによる新材料探索

UVU  
2D磁石



情報社会基盤研究センター

Research Center for Advanced Computing Infrastructure



ネットワーク  
経由で統合化

### KIST/プラットフォーム

Web成果公開/国際的なネットワーク活用

cscweb.kist.re.kr  
computational science center @ kist

# SimP

Simulation Platform Creator a2.1