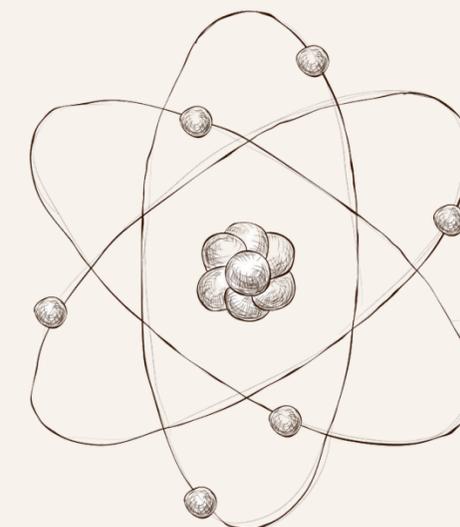


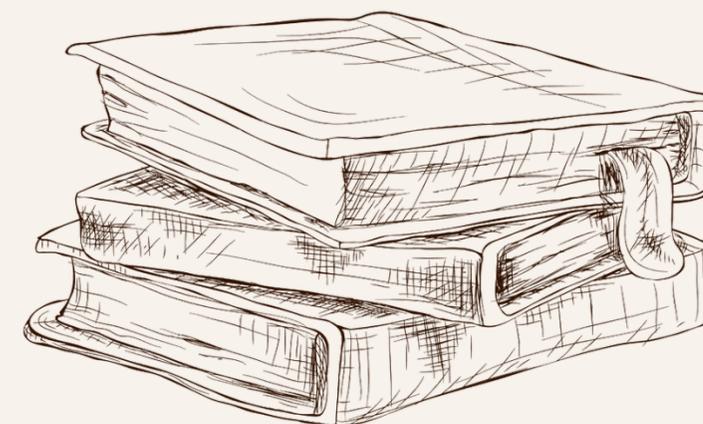
The future of sustainable science

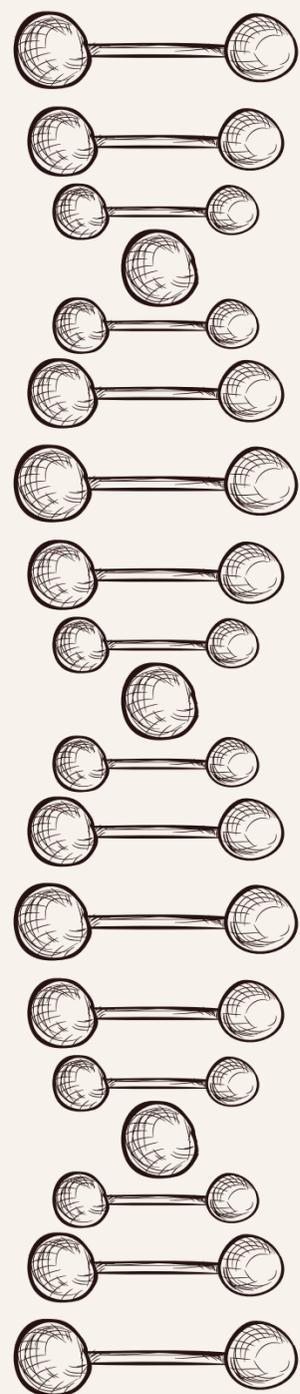
# マテリアルズプロジェクト のデータとCGCNNを用いた 先進材料分析の統合



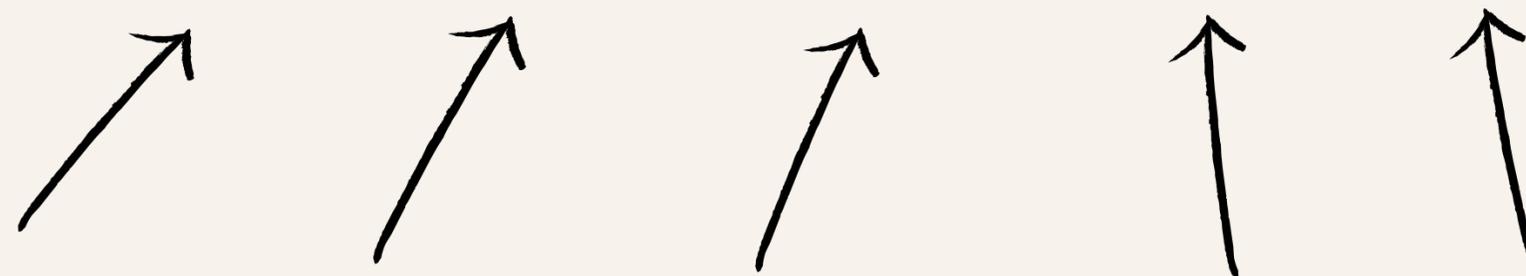
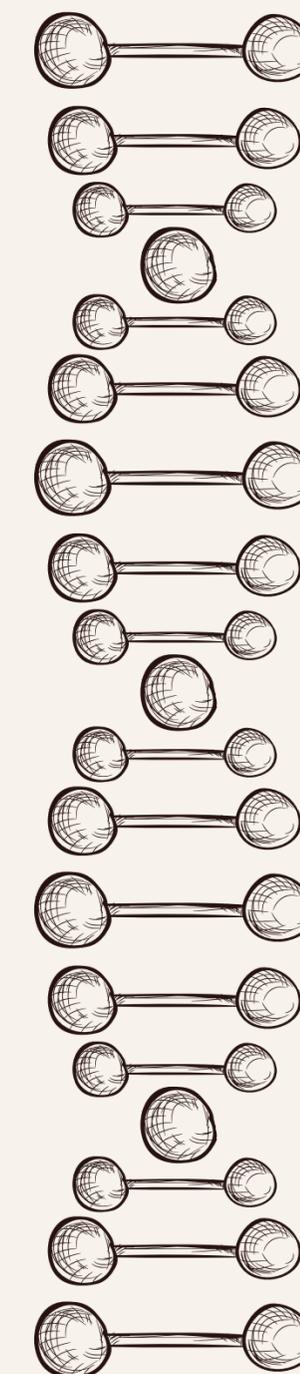
## 山田悟研究室

ハッシーンモハメッド





# CGCNN



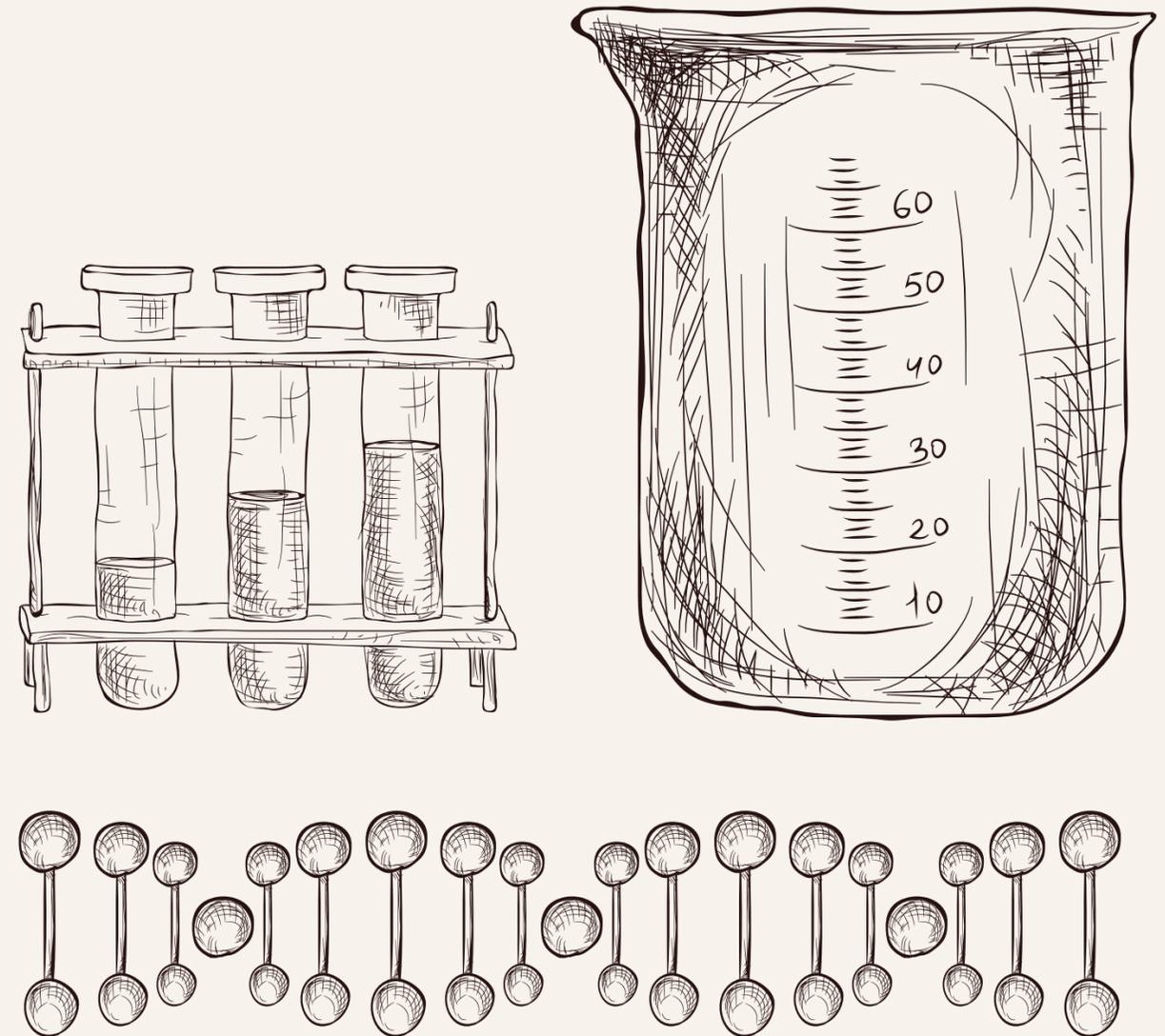
**Crystal Graph Convolutional Neural Networks**

**結晶グラフ畳み込みニューラルネットワーク**

# プロジェクト概要

**目的:** CGCNNを使用して材料科学の分析を強化

**長期目標:** 材料発見と最適化のための画期的な進歩を実現



# プロジェクトの フェーズ

01

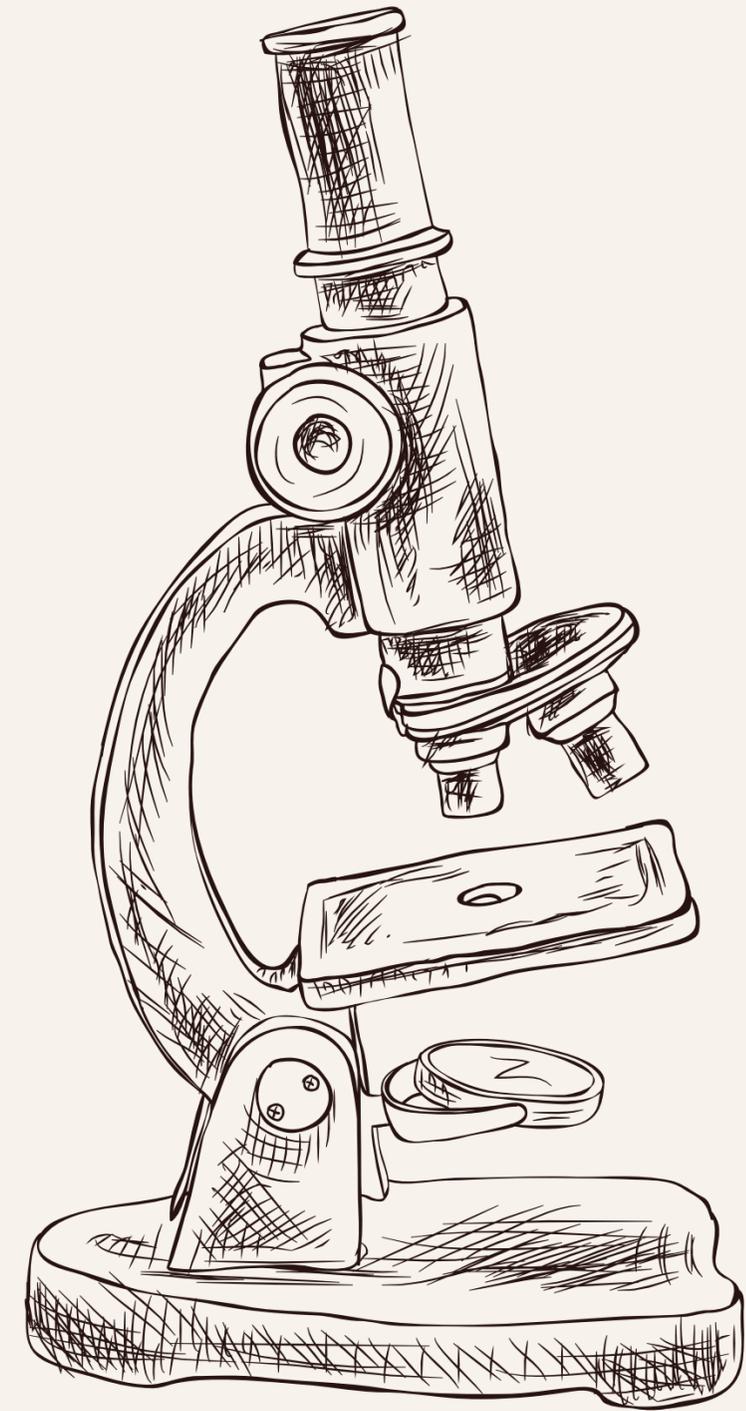
**フェーズ1:** マテリアルズプロジェクトのオープンソースデータベースからのデータ抽出用のPythonプログラムの開発。

02

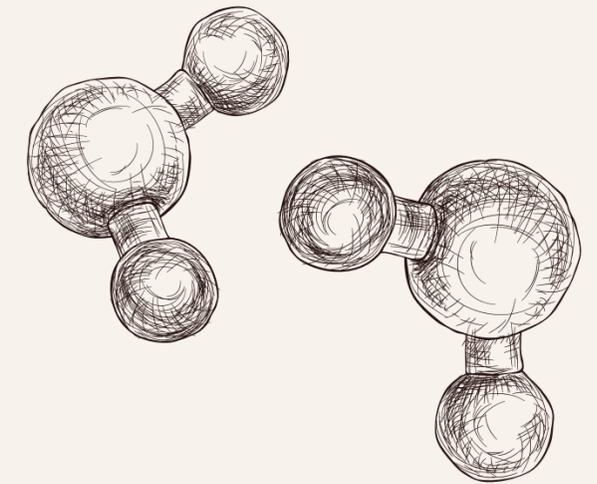
**フェーズ2:** 抽出したデータをCGCNNで使用できる形式に変換。

03

**フェーズ3:** CGCNNを使用して材料特性の予測や新材料の発見に向けた分析の実行。



# マテリアルズプロジェクトからのデータ抽出



Materials Explorer

References Documentation

**U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>**  
mp-308

TABLE OF CONTENTS

- Summary
- Crystal Structure
- Properties
- Contributed Data
- Literature References
- External Links
- More
- Related Materials

Energy Above Hull	0.003 eV/atom
Space Group	P6̄2m
Band Gap	0.00 eV
Predicted Formation Energy	-3.704 eV/atom
Magnetic Ordering	Ferromagnetic
Total Magnetization	2.00 μB/f.u.
Experimentally Observed	Yes

Description (Auto-generated)

U<sub>3</sub>O<sub>8</sub> crystallizes in the hexagonal P6̄2m space group. U+5.33+ is bonded to six O<sup>2-</sup> atoms to form distorted corner-sharing UO<sub>6</sub> pentagonal bipyramids. There are a spread of U-O bond distances ranging from 2.07-2.21 Å. There are three inequivalent O<sup>2-</sup> sites. In the first O<sup>2-</sup> site, O<sup>2-</sup>

01

マテリアルズプロジェクト: 材料の特性に関するデータベース。

02

注目するデータ: 結晶構造と化学特性。

# CGCNN形式への データ変換

01

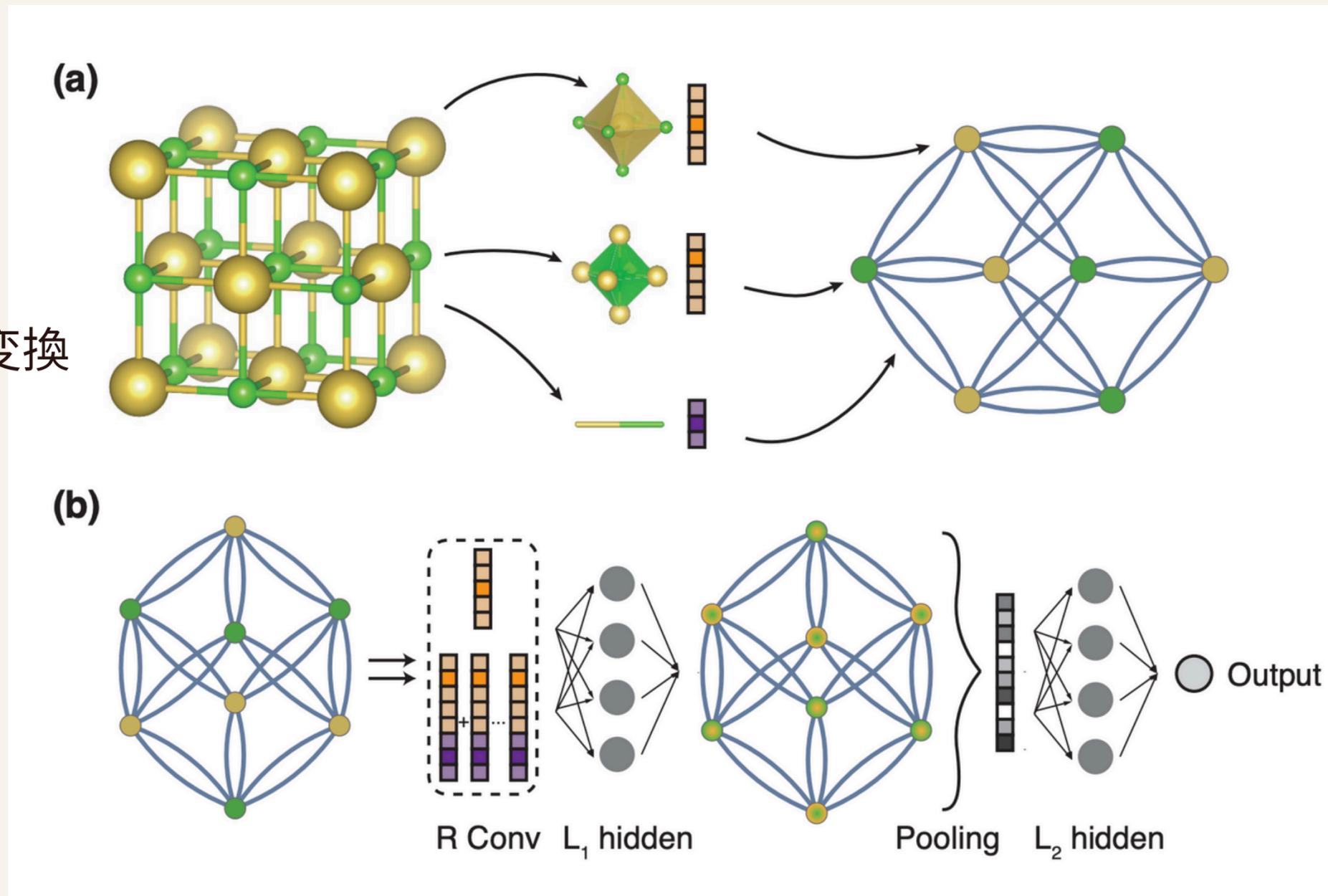
課題: 生データをグラフ形式に変換

02

計画されたアプローチ: 自動変換のためのPythonプログラムの開発

03

特徴: ノードに原子番号、電気陰性度を定義; エッジに結合長、タイプを定義



# 予想される課題



01

## データ品質の問題:

マテリアルズプロジェクトから抽出したデータには、不完全または不一致が含まれる可能性がある。

02

## 計算資源の制約:

CGCNNのトレーニングには計算資源が必要ですが、リソースが限られている可能性がある。

03

## 技術的な複雑性:

データをCGCNNで使用できる形式に変換するのが技術的に難しいかもしれない。

# Solutions:

01

基本的なデータクリーニング手法を適用し、品質を確保する。

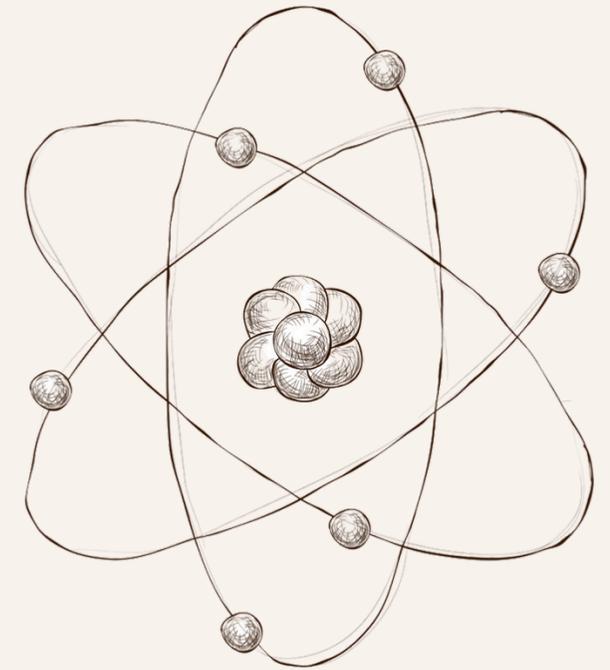
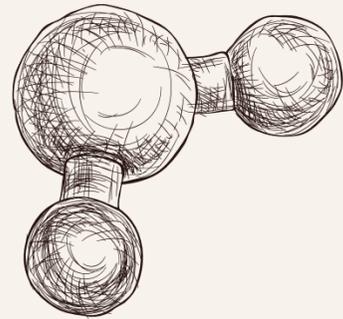
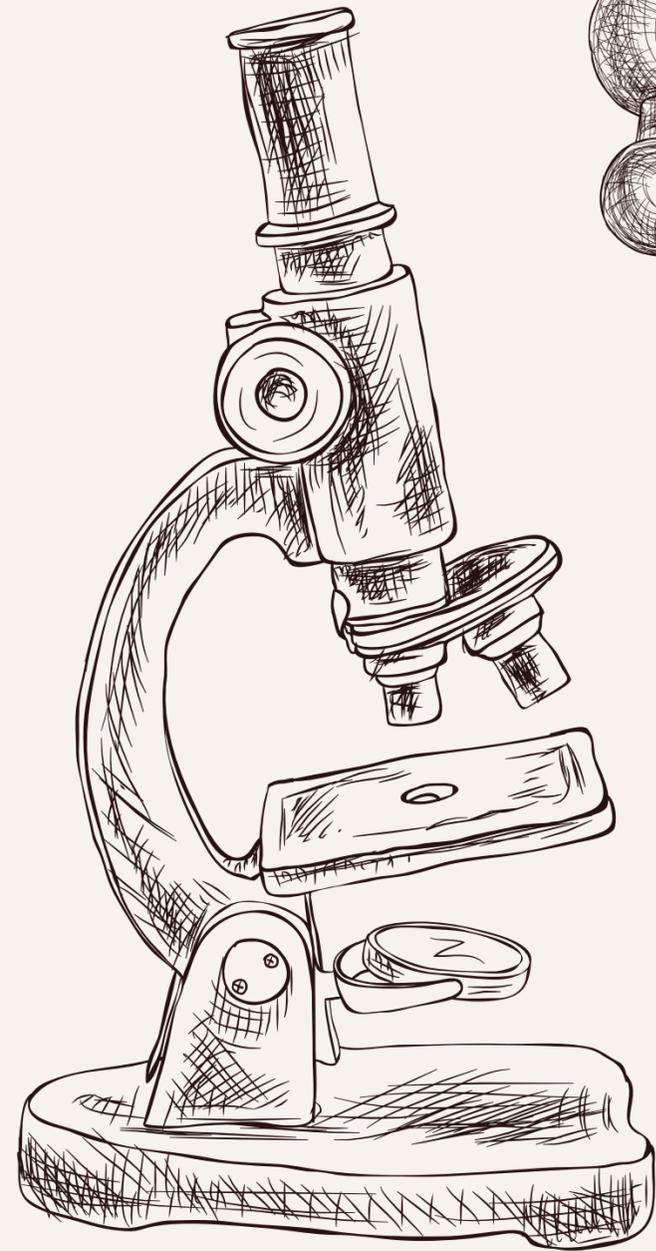
02

より効率的なデータ処理と、可能であればクラウドリソースを利用する。

03

簡単な変換プロトコルを初めに設計し、段階的に複雑な機能を組み込んでいく。





**Thank  
you!**

