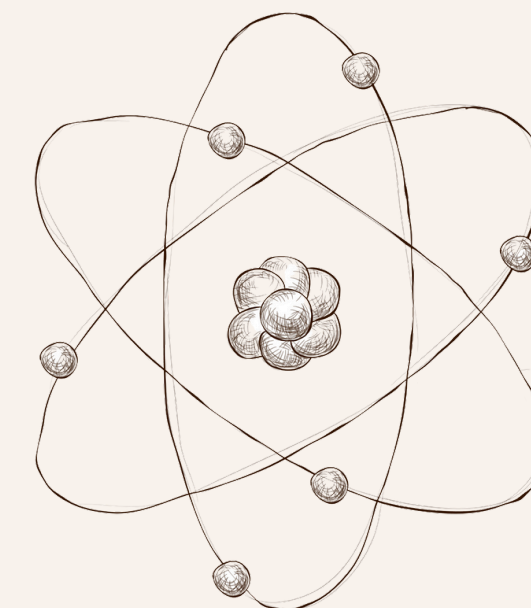


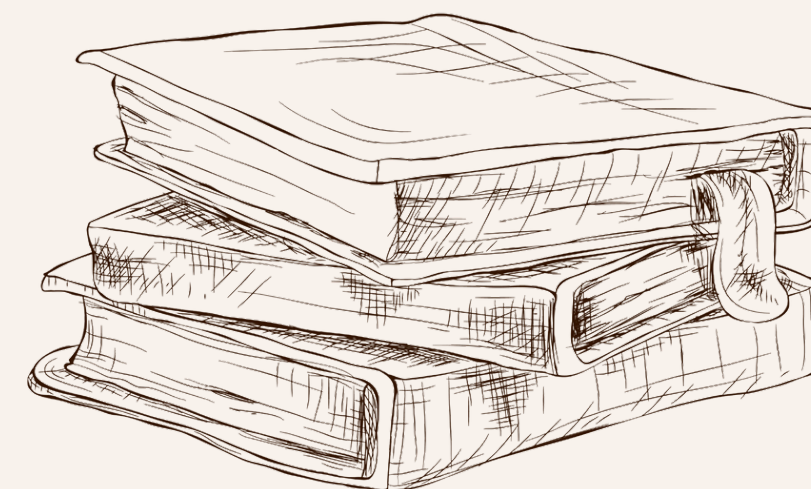
The future of sustainable science

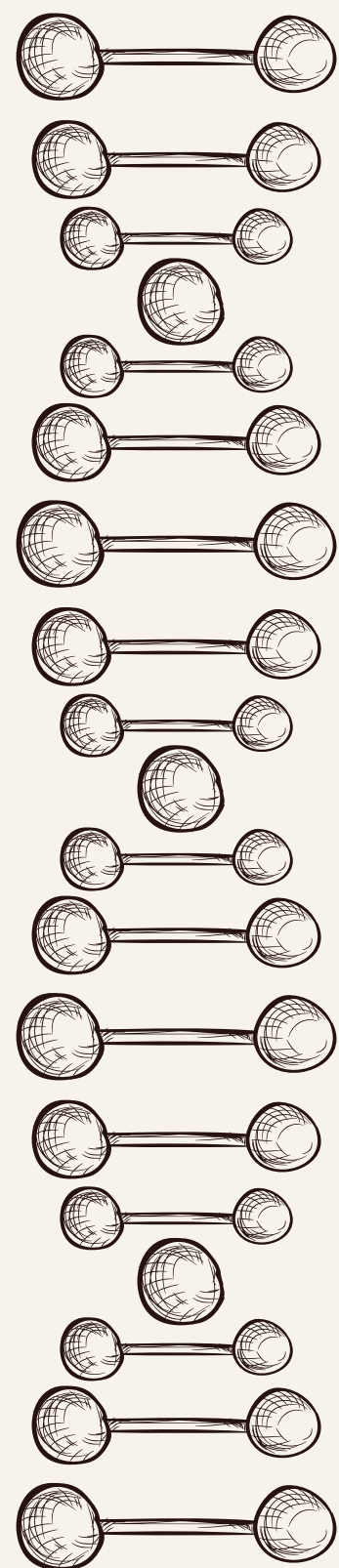
マテリアルズプロジェクト のデータとCGCNNを用いた 先進材料分析の統合



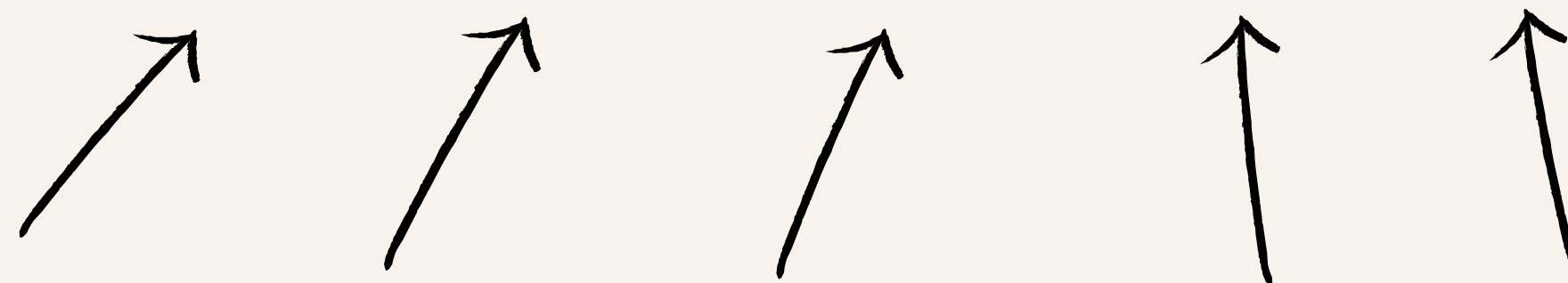
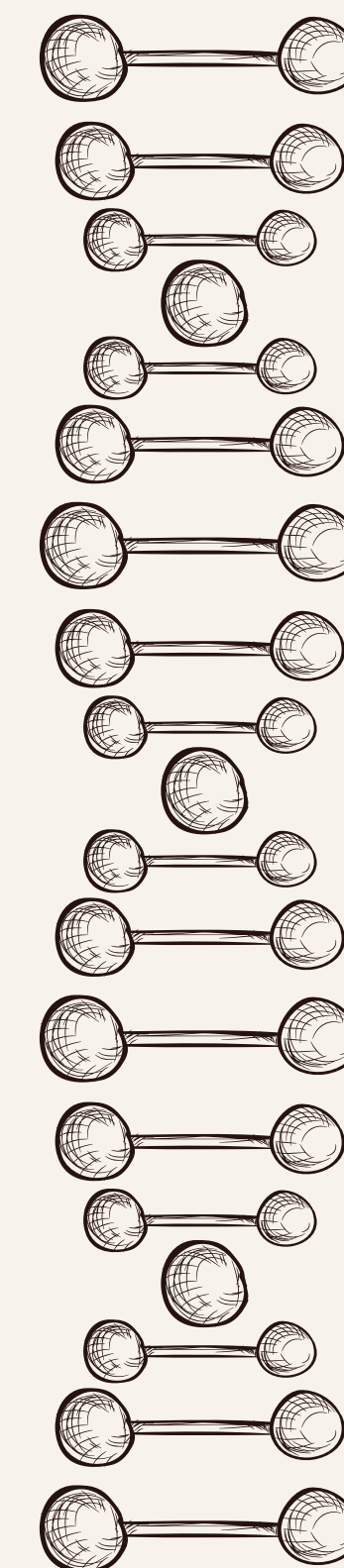
山田悟研究室

ハッシーンモハメッド





CGCNN



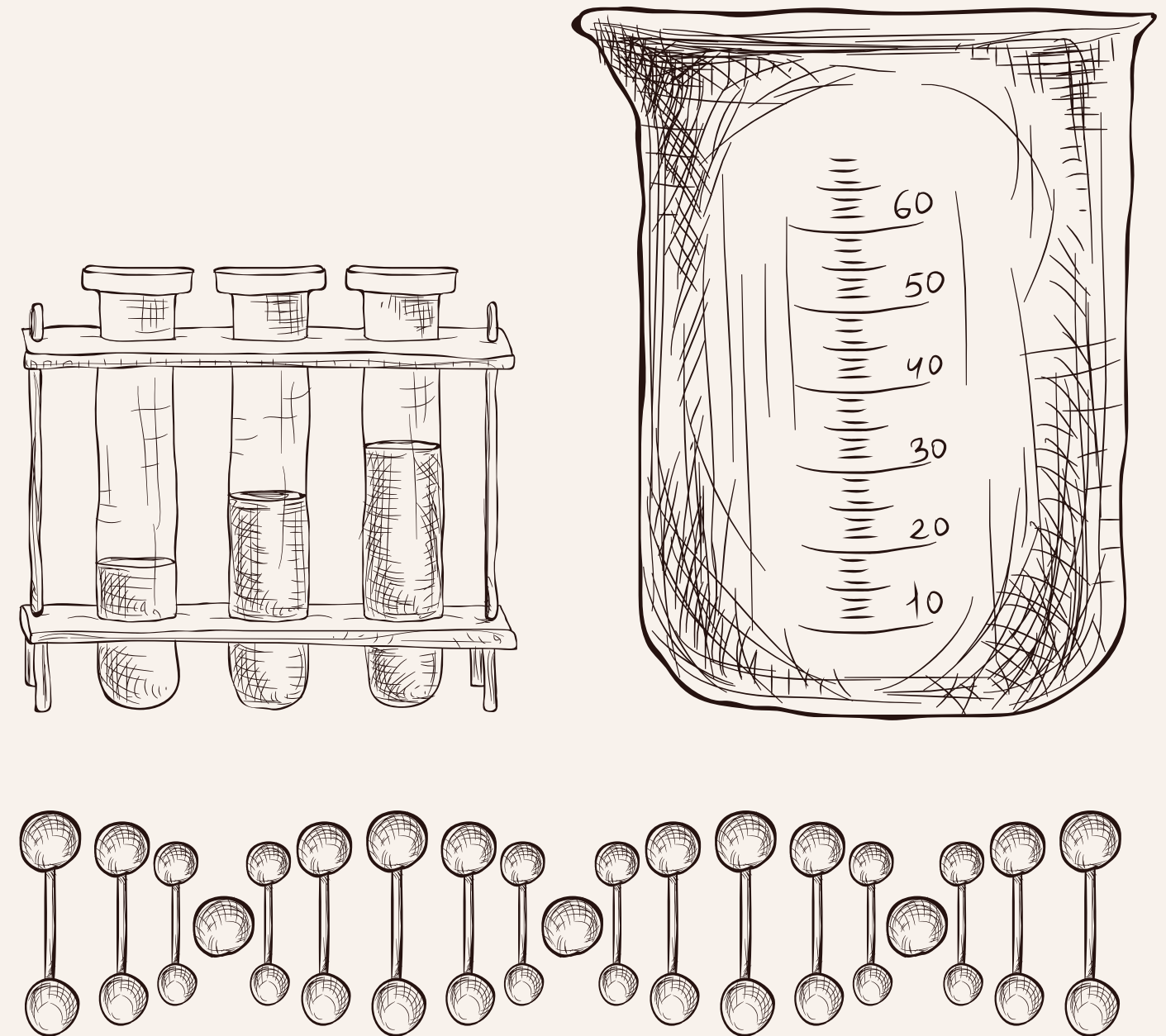
Crystal Graph Convolutional Neural Networks

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

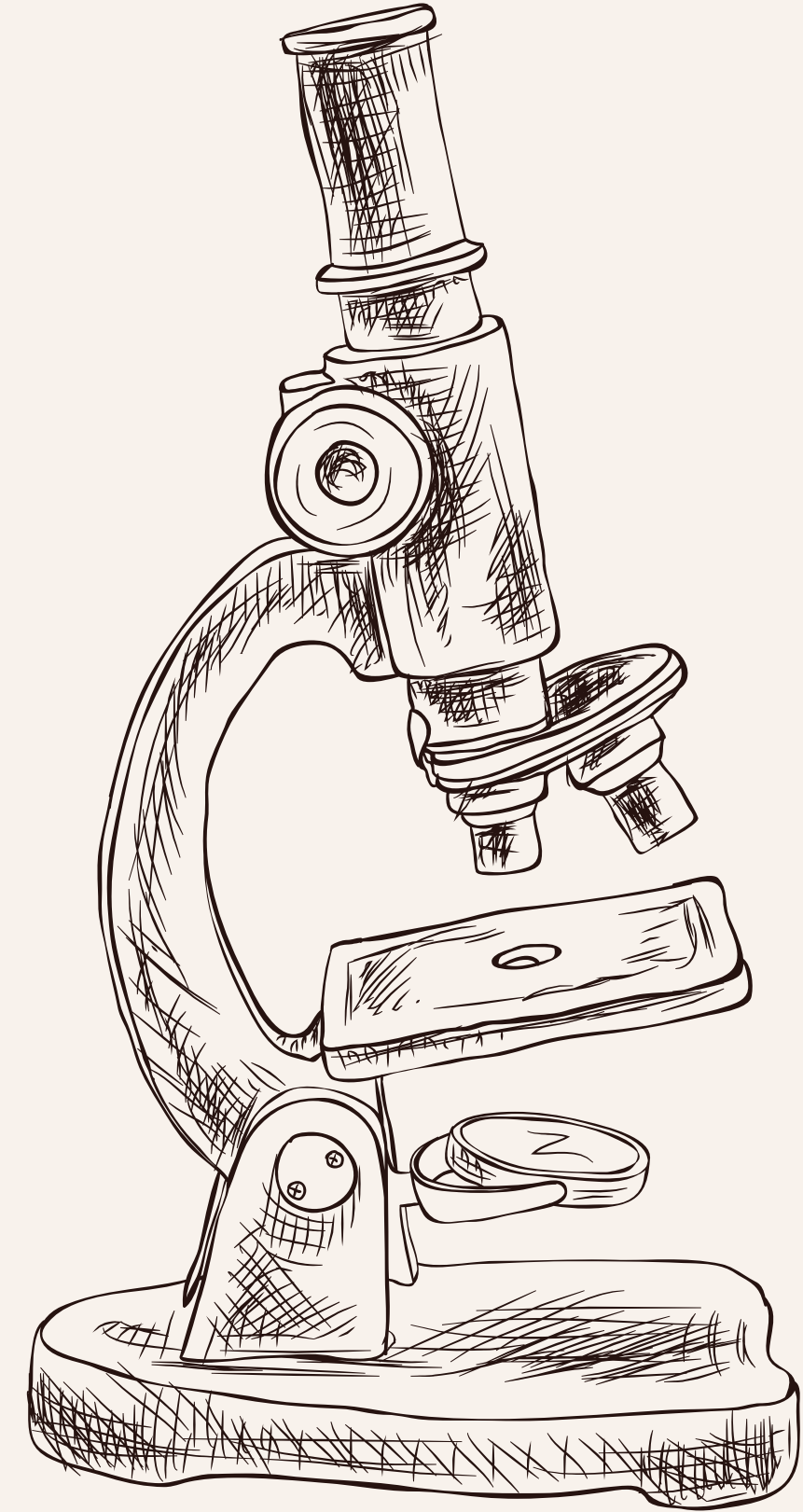
フェーズ1: マテリアルズプロジェクトのオープンソースデータベースからのデータ抽出用のPythonプログラムの開発。

02

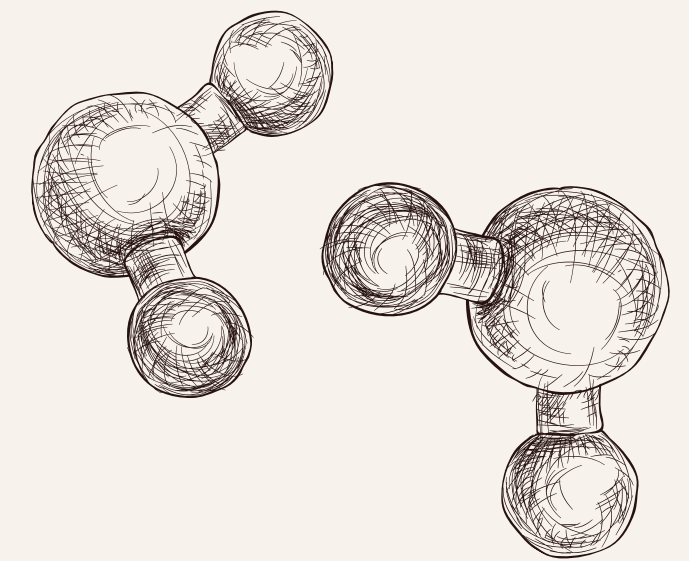
フェーズ2: 抽出したデータをCGCNNで使用できる形式に変換。

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

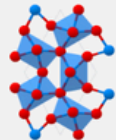
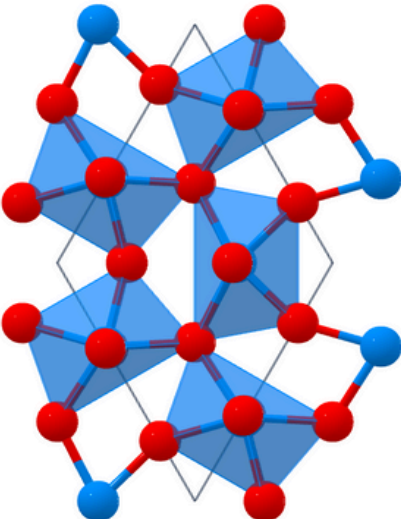
 **U₃O₈**
mp-308

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)

U₃O₈ crystallizes in the hexagonal P6̄2m space group. U+5.33+ is bonded to six O²⁻ atoms to form distorted corner-sharing UO₆ pentagonal bipyramids. There are a spread of U-O bond distances ranging from 2.07-2.21 Å. There are three inequivalent O²⁻ sites. In the first O²⁻ site, O²⁻

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

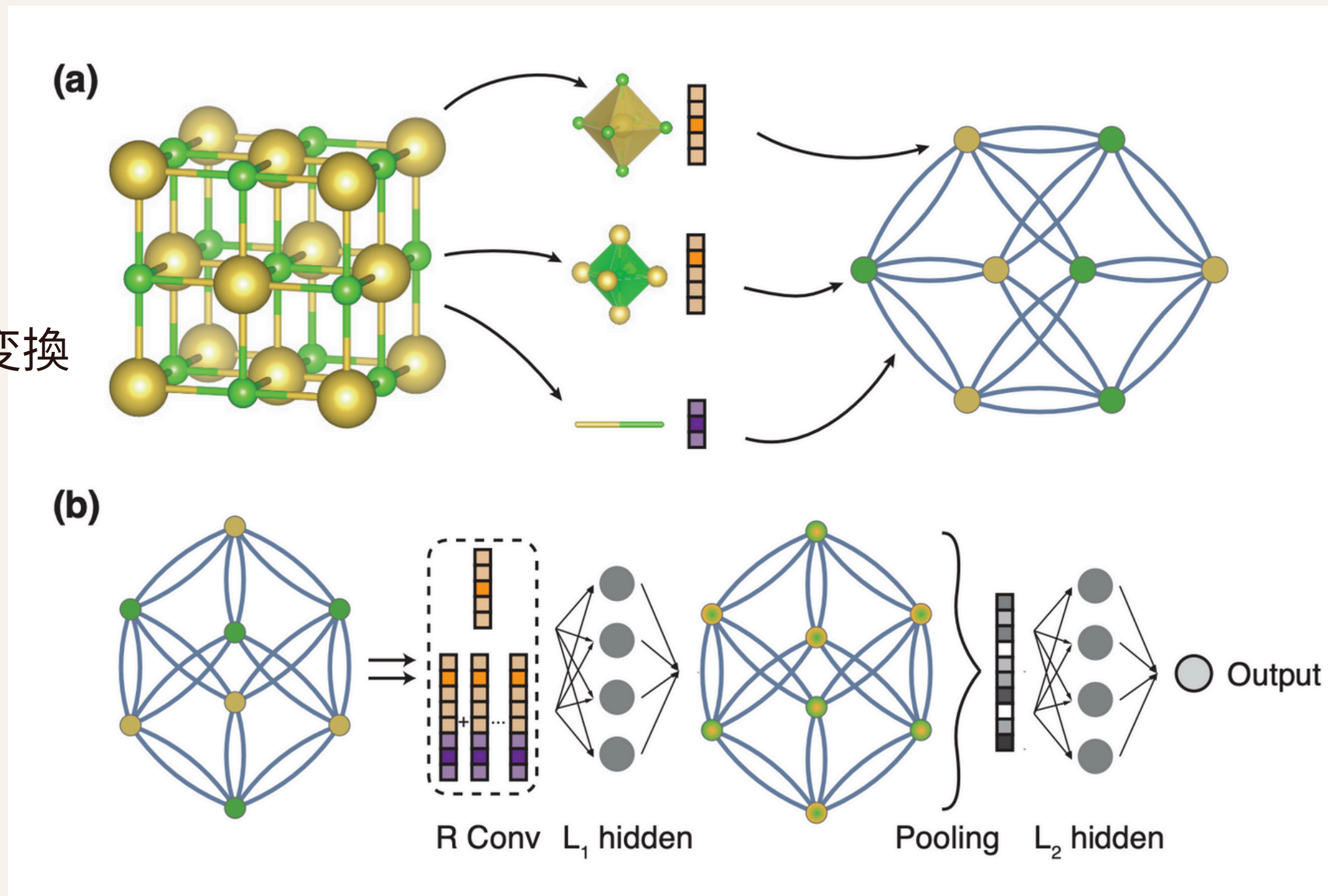
課題: 生データをグラフ形式に変換

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。

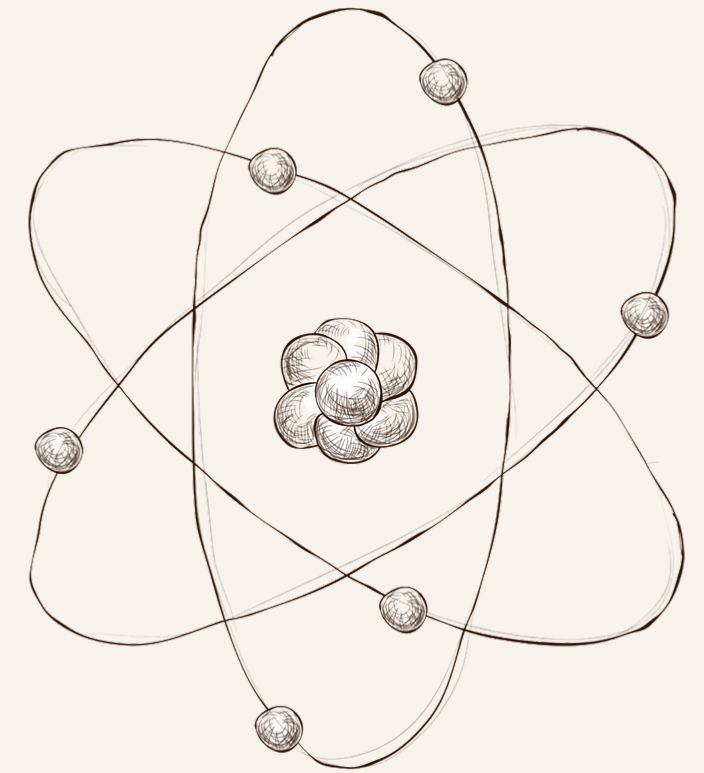
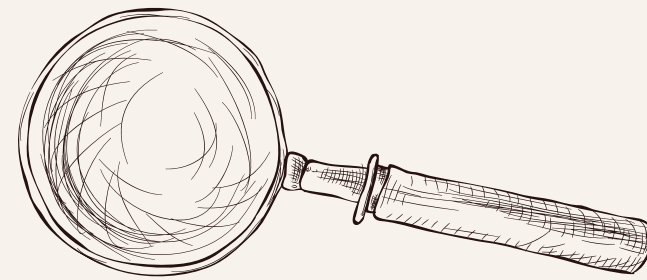
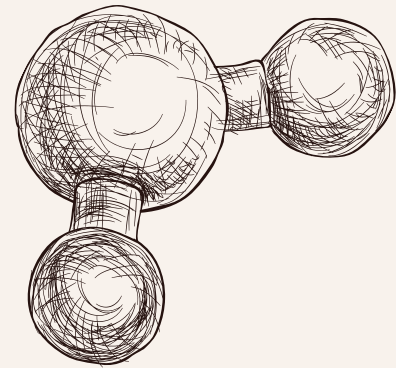
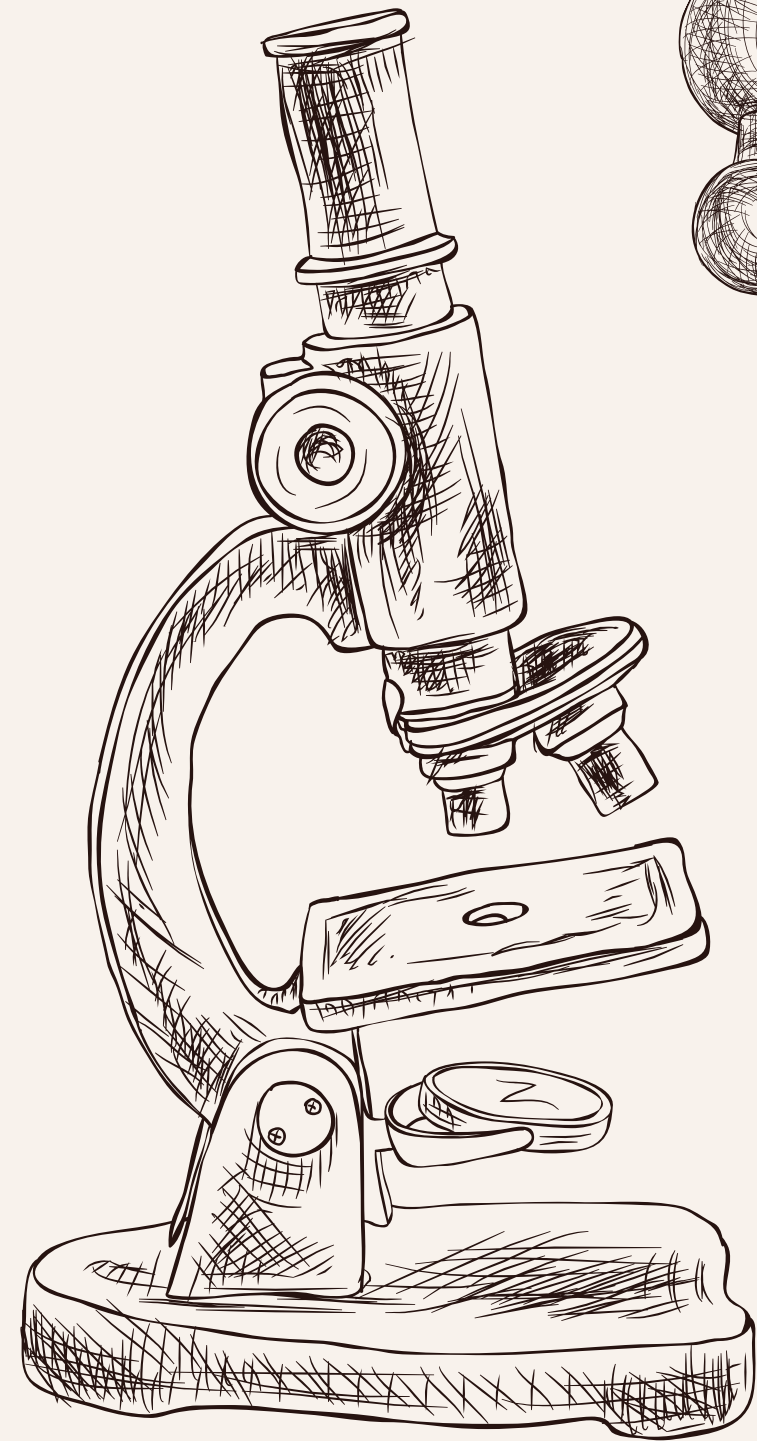
02

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!**

