

データ駆動型 AI セミナー

信州大学 アクア・リジェネレーション機構（ARG）は下記のセミナーを企画いたしました。皆様のご参加をお待ちしております。

日 時 : 2025 年 10 月 9 日（木） 15:00～17:00

場 所 : 信州大学長野(工学)キャンパス

AICS4 階コミュニケーションルーム

Zoom（参加ご希望の方はお問い合わせください）

講 演 1 : Dr. Pavel Sidorov (北海道大学 化学反応創成研究拠点 (ICReDD) Junior PI, Associate Professor)

「From experiments, to experiments: lab meets informatics」

要 旨 : Effective usage of chemoinformatics tools requires high-quality data, so the collaboration with the experimental and/or computational chemistry groups is paramount. However, this also requires the development of tools that facilitate work on both ends. In this presentation, some tools that were developed in our group are shown and discussed.

講 演 2 : 安村 駿作 博士（東京大学・助教）

「ニューラルネットワークポテンシャルを活用した固体触媒開発の可能性」

要 旨 : 第一原理計算と同程度の精度を維持しつつ、高速な計算を可能にするニューラルネットワークポテンシャル（NNP）の活用が急速に広がっている。NNP を汎用的な反応力場と捉え、反応経路自動探索法と組み合わせることで、始状態を起点に数千にも及ぶ反応パスを効率的に探索することが可能となる。本講演では、探索された広大な反応パスを速度論解析し、固体触媒の定性的な活性予測に取り組んだ事例について紹介する。

お問い合わせ : koyama_michihisa@shinshu-u.ac.jp