

第83回RISMセミナー データ駆動型AIセミナー(第23回)

高分子からなる柔らかい界面の機械学習モデリング

増田 造 助教 (東京大学 大学院工学系研究科)

機械学習などの情報科学の手法により材料の構造-物性相関研究を行う取り組みは、高分子材料分野においても大きな注目を集めている。高分子材料の界面物性は、親水化による防汚表面や生体材料をはじめとする材料設計において重要な役割を担う。こうした界面の性質が定量的な構造-物性相関により予測と解釈が可能になれば、複雑な因子が関わる材料設計を加速できると期待できる。本講演では、高分子の精密重合による得られるポリマーブラシを構造制御されたモデル界面として、界面物性やタンパク質吸着に関する機械学習モデリングを発表する。

反応経路を生成するニューラルネットワークの開発

林 亮秀 氏 (株式会社 Preferred Networks)

近年生成AIの発展が著しく、原子構造に対する生成モデルも開発が進んでいる。本講演では反応経路を生成するニューラルネットワークに焦点をあてて解説する。この技術は非線形な経路や複数の経路があることによる反応経路解析の難しさに対する解決法となる可能性がある。また、近年の機械学習ポテンシャルの発展により可能になった大規模なデータセット生成に加え、生成モデルや反応経路解析の技術や手法についても紹介する。