

第79回RISMセミナーシリーズ データ駆動型AIセミナー(第22回)

Machine Learning Glassy Dynamics - Current Status and Possible Applications

Dr. Hayato SHIBA (Assoc. Prof. of The University of Hyogo)

When a liquid is rapidly cooled, it often solidifies into a glass, preserving a random atomic configuration. Predicting which particles are more likely to rearrange from this initial atomic configuration has long been a formidable challenge. Recently, Graph Neural Networks (GNNs) have been shown to be well suited for such tasks, and various machine learning methodologies have been consequently proposed. In this lecture, I will give an overview of recent developments and discuss potential applications of these new tools.

データ駆動型研究の自動車触媒への実践的応用

神山 梓 氏 (株式会社本田技術研究所)

自動車触媒の開発課題である浄化性能の向上とコスト低減に対して、特異的な反応性や耐久性を有するハイエントロピー合金は有力な解決策である。膨大な元素種や組成、合成条件の組み合わせに対して、データ駆動型研究を用いた実践的な取り組み事例を紹介する。