

第89回RISMセミナーシリーズ データ駆動型AIセミナー(第26回)

Sim2Realマテリアルズインフォマティクス：高分子材料データの
の乏しさを分子シミュレーションにより克服する

林 慶浩 助教（統計数理研究所 データ科学研究系）

データ駆動形の高分子材料研究において、実験データベースの乏しさが大きな課題となっている。そこで、高分子物性計算を完全自動化するオープンソースソフトウェア RadonPyを開発し、大量のシミュレーションデータを生成した。このデータを用いて事前学習を行い、サンプル数の少ない実験データをターゲットタスクとした転移学習を行うとともに、事前学習データ数に対する汎化性能のスケールリングを観測した。