

# 2024年度分子研異分野技術交流セミナー（第4回）

～ 機械学習の材料開発への応用 ～

**主催**：文科省マテリアル先端リサーチインフラ **共催**：大学連携研究設備ネットワーク

**日時**：2024年8月30日（金）13:30～17:00

**場所**：分子科学研究所 研究棟 301 + Zoom meeting (ハイブリット)

**プログラム**：(講演 40 分、質疑応答 10 分; 休憩 10 分)

13:30～14:10 デジタル技術とリアル技術のクローズドループによるプロセス・材料探索

**講師**：藤井 幹也 (奈良先端科学技術大学院大学)

**概要**：

本講演では当研究室で行っているデジタル技術を活用したクローズドループ材料開発に焦点を当て、コポリマーのプロセス最適化と無機材料の逆設計の2つの研究を紹介する。最初の研究では、5種類のコポリマーの調製とそのモノマー転化率及び組成比の分析を行い、量子化学計算と機械学習に基づくモデルを用いて高い予測精度を実現した。第二の研究では、物理的記述子を活用した条件付き GAN を開発し、所望の特性を持つ材料の生成に成功した。また、敵対的生成ネットワークと物理シミュレーションを組み合わせた新しい材料探索手法についても述べる。



14:10～15:00 自動化学実験で大規模言語モデルを活用するにあたっての現状と展望

**講師**：畠山 歆 (東京工業大学)

**概要**：

ChatGPT を皮切りに、大規模言語モデル (LLM) の普及が世界的に進んでいる。化学研究における LLM の活用事例はまだ少ないが、専門ドメインへのカスタマイズが進行中である。本発表では、LLM の国内外の現状を概観し、化学研究への適用事例を中心に、発表者らの研究成果を紹介する。特に、GPT-4 の化学的タスクにおける性能評価やラボオートメーションへの実践的応用などについて取り上げる。



15:10～16:00 分子・物質系の機械学習の基礎

**講師**：白男川 貴史 (分子科学研究所)

**概要**：

多様な分子と物質のデータから、機械学習を用いて化合物空間を理解し、新奇機能物質を探索する取り組みが進んでいます。本講演では、分子・物質科学分野における構造物性相関に関する機械学習モデルの構築について、最近の応用例とともに、(1)その概念と意義、(2)物質の表現方法、(3)基本的な手法の基礎を概説します。



16:10～17:00 講師を囲んでプチ交流会・計算科学研究センター見学等 (現地参加者のみ)

**参加登録**：下記サイトからご登録をお願いいたします。Zoom の URL とパスコードを配布いたします。

【登録フォーム】 <https://registration.ims.ac.jp/exchangeseminar0830>

定員：60 名程度 (現地参加：大学技術職員等、先着順に旅費支給あり)

締切：定員数に達し次第



**お問い合わせ先**：賀来 美恵 [mkaku\_at\_ims.ac.jp (at は@に変換してください)]