

第281回 IBBセミナー

光触媒の活性を予測する 機械学習法の開発

納戸直木 助教

名古屋大学 学際統合物質科学研究機構

日時：2025年2月21日(金) 16:00～17:00

場所：22号館 1階 第2会議室



講演概要

近年、有機合成研究の効率化・深化を目指して、機械学習を活用する試みが注目を集めている。本発表では、主に光触媒の活性予測をターゲットとした機械学習に関する最近の研究を紹介する。

実験化学と機械学習の統合を難しくする要因として、実験で現実的に取得できるデータ数と比較して、高精度なモデルを構築するためには多量の学習データが必要となる点が挙げられる。この課題を克服するためのアプローチとして、特に転移学習に焦点を当てて、その有効性や可能性について議論を行う。

お問い合わせ：生命有機化学分野 隅田 有人 (内線：8114)

E-mail: sumida.yuto@tmd.ac.jp