

第58回RISMセミナー データ駆動型AIセミナー(第14回)

実験系インフォマティクスにおける科学知識の考慮 と物性予測モデルの改善

講演者：畠山 勲 助教 (東京工業大学 物質理工学院)

一般にAIは「科学知識」を持たないため、物性予測モデルを設計しても、必ずしも正統な推論が行われるとは限らないという課題があった。その解決に向け、実験化学・AI分子シミュレーション・大規模言語モデル等によって「科学知識」をシステムに組み込み、予測精度を向上させる最近の試みについて紹介する。