

# 第73回RISMセミナーシリーズ データ駆動型AIセミナー(第19回)

『深層学習を用いた結晶構造の表現と生成、物性予測』

鈴木雄太 様 (トヨタ自動車株式会社)

近年、結晶構造をグラフ構造として表現するアプローチを突破口として、結晶構造への深層学習の応用には大きな発展がもたらされた。講演者は『AI-assistedな物質・材料の理解』を掲げ、機械学習技術を用いた材料研究の基盤技術を模索してきた。

本講演では、最近の研究動向を概観しつつ、講演者らの最近の研究から、

- 1) 結晶構造を入力とする深層学習技術
- 2) 結晶構造の意味的類似度を捉えた表現を学習する技術
- 3) 結晶構造を生成する深層学習技術

について紹介する。