

# マニフォールド学習と分子シミュレーションを用いた ソフトマテリアル材料開発基盤の研究

東北大学 大学院工学研究科 吉留 崇

目的 マニフォールド学習を用いて材料の構造と物理量の関係を構築すること

内容 多孔質材料の構造とガス拡散係数の関係やタンパク質構造と溶媒和エントロピーの関係などをマニフォールド学習を用いて構築する

結果 マニフォールド学習を用いて関係を構築できることがわかった  
例えば、タンパク質構造と溶媒和エントロピーを  
関係づけることができた (右図)

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群  
ノード時間 11,000 時間

