

「博士・修士課程学生のための国際研究集会渡航助成」 事後報告書

総合文化研究科広域科学専攻関連基礎科学系
理論化学研究室 博士課程 4年 貞金 輝久

私は今回採用していただいた国際研究集会渡航助成により、2025年12月15日から20日に開催された環太平洋国際化学会議2025（The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025; Pacificchem 2025）に参加しました。本学会は太平洋化学協会が共催する5年に1度ホノルルで開かれる大きな国際化学会議です。

私は19日に、「Analysis of Chemical Knowledge Acquisitions by Graph Neural Networks」というタイトルでポスター発表を行いました。本研究では、分子物性予測に用いられるグラフニューラルネットワーク（Graph Neural Networks, GNN）が、学習過程においてどのような化学的知識を獲得しているのかを、説明可能AI手法を用いて解析しました。海外の研究者から質問やコメントをいただき、機械学習と化学的直観の橋渡しという本研究の視点に対して高い関心が寄せられました。

また、自身の発表日以外には、異分野の研究発表を数多く聴講することができました。特に、実験研究者が新規物質を合成・設計する過程において直面している課題や困難について理解を深めることができ、自身の機械学習を用いた研究を、実験的研究とどのように結び付けていくべきかを改めて考える機会となりました。

本国際会議への参加を通じて、自身の研究を多角的な視点から見直すとともに、今後の研究をさらに発展させるための重要な知見と刺激を得ることができました。今回得られた経験と議論の内容を、今後の研究活動および論文執筆に積極的に活かしていきたいと考えています。

最後に、本渡航助成を通じてこのような貴重な国際研究集会への参加の機会をご支援いただきましたことに、心より感謝申し上げます。

