



第6回UDACセミナー

機械学習・AIを用いた新たな 分子・物質の開発

2024

4/25 THU 14:30-16:30



講師

津田 宏治

東京大学大学院新領域創成科学研究科
メディカル情報生命専攻教授, 理研AIP,
NIMS

会場

東北大学青葉山キャンパス
情報科学研究科棟2階207中講義室

対象者

データ科学に興味のある学内外の研究者、学生、企業技術者の方々

望みの機能を持つ新たな分子・物質を設計することは、科学的・産業的に大きな意義を持つ。重要な対象としては、金属・セラミック・ナノ粒子などの無機物質や、創薬で重要な低分子有機化合物などが挙げられる。本講演の冒頭では、ベイズ最適化、モンテカルロ探索、深層学習などを用いた分子・物質の開発事例を紹介する(熱輻射材料、蛍光分子、蛍光タンパク質、抗菌ペプチド)。物質設計は、一般にブラックボックス最適化として定式化されるが、設計した物質に関する解釈ができないという問題を抱えている。本講演の中盤では、Entropic samplingを用いることで、解釈可能な形で物質設計を行う手法について述べる。機械学習・AIにおいては、データ数はできるだけ多い方がいいため、実験の効率化が重要である。本講演の最後では、自律自動実験のための汎用ソフトウェアNIMS-OSを紹介し、ロボットを用いた自動実験の事例を示す。

参加申込み

右記QRコードまたは下記WEBサイトよりお申し込みください。
<https://forms.gle/tEs3bbWf9h7aahgp8>



申込み切

4/24

THU

お問い合わせ

● 未踏スケールデータアナリティクスセンター セミナー事務局
✉ udac_seminar@grp.tohoku.ac.jp



東北大学
未踏スケールデータアナリティクスセンター
Unprecedented-scale Data Analytics Center, Tohoku University

主催●東北大学未踏スケールデータアナリティクスセンター
<https://udac.tohoku.ac.jp>