



AI 主題_學術研究工作坊-化學應用

時間：2018-11-29

地點：守謙 HC306、HC307

早在 20 年前人工智慧中的神經網路(Neural Network)演算法就已被先進的研究團隊用在化學領域的學習及預測上，試圖創造一顆懂化學的強大機器腦袋。然而受限於當時的電腦運算能力與其他關鍵的演算法尚未被提出與使用，直到進 5 年多來所延伸出來的深度學習(deep learning)演算法出現了許多突破性的發展與應用，利用新的演算法搭配 python 語言、TensorFlow 架構以及強大的 GPU 平行運算等工具，驅使許多嶄新的化學領域上的機器學習與預測一個一個被實現出來，諸如藥物或有機物分子的篩選預測、光譜辨識、物化性質分類、分析化學預測，以及量子化學為基礎的結構模擬、總能計算、反應途徑預測等...，深度學習在物理及化學領域上的應用將越來越重要也可望持續蓬勃發展下去。

在這個活動中，首先我們將探討 1990 年至今的 Neural Network 在化學問題上的機器學習與預測方法及成果，並研討如何將人工智慧運用在化學領域的問題解決與應用上，同時從實務的層次來看人工智慧結合化學電腦模擬及預測的可行性。另一方面，講者周博士的團隊也正致力於 AI 的科普發展，試圖結合機器視覺與 AR(擴增實境)發展出立體分子結構辨識的應用，並研發應用在化學及基礎教育應用的 programmable AI platform 前瞻產品，期望將 AI 應用推向 STEAM 的普及教育層次。非常特別的是，周博士也特別在活動中進行了若干的現場 demo 與聽眾互動分享與討論，讓這些實施的方法與經驗更具體化的呈現出來。



演講實況