

テーマ

「人工知能技術を用いた新しい分子・物質の発見」

AI-based discovery of new molecules and materials

講演者: 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

津田 宏治 氏

日時: 平成30年12月20日(木) 15:00~17:00

場所: 情報科学系研究棟Ⅲ棟5階

コラボレーションルーム7

講演要旨:

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、核酸・タンパク質などの生体高分子や、金属・セラミック・ナノ粒子などの無機物質、創薬で重要な低分子有機化合物などが挙げられる。ベイズ最適化やモンテカルロ木探索などの人工知能技術を用いた自動設計は、近年注目を集めているが、未だ科学界・産業界に浸透しているとは言えない。本講演では、様々な対象の設計問題が、ブラックボックス最適化という共通した数理基盤の上で扱えることを指摘する。さらに、データからの機械学習、膨大な空間を効率的に探索する離散アルゴリズム、物理法則から物性値を正確に予測する第一原理計算、ウェットラボにおける検証実験の強力な組み合わせにより、様々な分子・材料設計問題が解けることを示す。

講演者略歴:

1994年 京都大学工学部情報工学科卒業
1996年 同大学院工学研究科情報工学専攻修士課程修了
1998年 同博士課程修了、電子技術総合研究所入所。2000年独 GMD FIRST 客員研究員
2003-2004年 独 Max Planck 研究所研究員
2006-2008年 同チームリーダー
現在、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 博士(工学)
物質・材料研究機構情報統合型物質・材料開発イニシアティブデータ科学チーム長、
理化学研究所革新知能統合研究センター分子情報科学チーム長兼任

お問合せ先: 共通事務管理課共通事務第二係 (E-mail: is-secr)

参加申込・予約は不要です。直接会場にお越しください。