



統計科學研究所

INSTITUTE OF
STATISTICAL SCIENCE



S.E.M.I.N.A.R.

S.T.A.T.I.S.

Seminar

Title : Tukey計畫口頭報告「A data-driven approach to the property estimation and structural generation of molecules via deep learning」

Speaker : Dr. Tso-Jung Yen and Dr. Frederick Kin Hing Phoa
(Institute of Statistical Science, Academia Sinica)

Time : 10:30 AM~12:00 PM, Monday, Dec 12, 2022

Place : Auditorium, B1F, Institute of Statistical Science

Abstract

在量子物理學中，密度泛函理論一般用於計算分子性質，但即使對於結構簡單的小分子，其計算速度也很慢。本計畫的第一部分旨在開發一種基於機器學習的方法，利用大分子數據庫來分析分子。具體來說，我們構建了定制的圖神經網絡來預測12種常見的分子特性，並使用Adam優化算法在QM9數據集上訓練我們的圖形神經網絡。初步研究顯示我們的模型在與其他利用量子力學知識和複雜幾何約束的高級模型具有一定的競爭力。當我們建立了一台能夠基於分子結構來推估分子特性的模型後，本計畫的第二部分旨在開發一套元啟發式方法來組裝從未被發現過的或是推薦已存在但未更深度研究的分子，它的某些我們感興趣的分子特性是最佳的。我們在這套SIB方法中特製了新的MIX操作，其中包括EXCHANGE和MUTATION操作，用以配合化學反應的複雜性和分子結構的限制，以致所產出具有興趣特性的分子，其最佳化能夠涵蓋大多數有機分子，而且這些分子可以在現實中人工發現或組裝。

※ The tea reception will be held at 10:10.