

Zalety, wady i zastosowanie metod sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego w chemii.

dr hab. Rafał Kurczab, prof. AT

20.11.2026

Wykład

9:45-11:15

Sala b028

Sztuczna inteligencja (AI) weszła w ostatnich latach przebojem na salony każdego niemal aspektu życia człowieka, w tym również nauki. Zakres stosowania AI jest bardzo szeroki, od rozpoznawania mowy i obrazu po projektowanie substancji o pożądanych przez chemika właściwościach. Podczas wykładu omówione zostaną podstawowe koncepcje AI, ze szczególnym uwzględnieniem uczenia maszynowego. W celu zobrazowania, jak działa uczenie maszynowe, omówiony zostanie algorytm drzewa (i lasu) decyzyjnego na przykładzie klasyfikacji i regresji danych chemicznych.

Demonstracje:

Symulacje komputerowe i wybrane reakcje charakterystyczne związków organicznych np. z grupą OH, czy C=O, pokazanie prostego przykładu jak uczenie maszynowe wspomaga działania w chemii - regresja (modele QSPR) oraz klasyfikacja (np. rozróżnianie gatunków kawy na podstawie widm FTIR ziaren lub inne przykłady rozróżniania).