

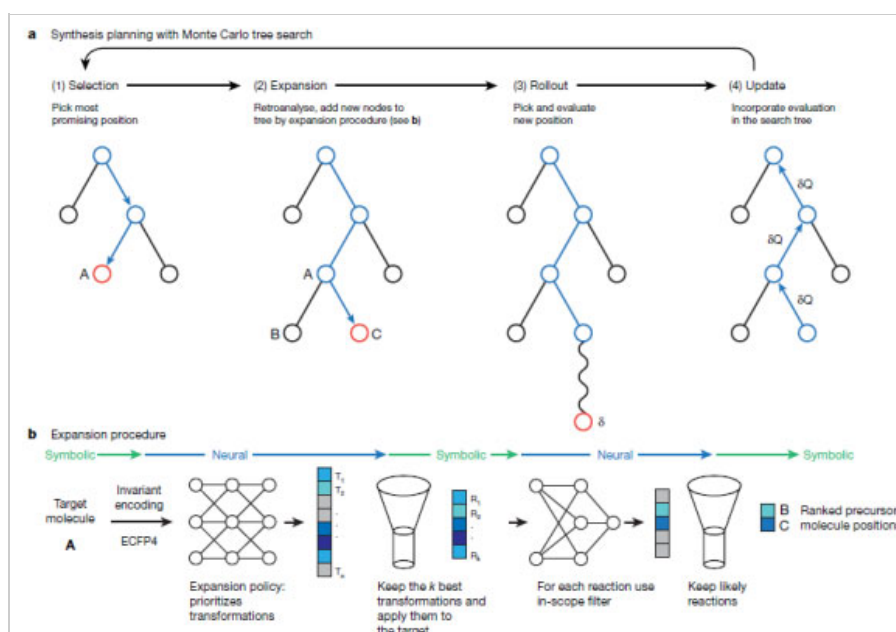
[▷ 首页](#)

## 上海大学量子与分子结构国际中心、上海大学理学院东方学者Mark Waller教授发表人工智能领域Nature论文

发布日期: 2018/04/02 投稿: 龚惠英 部门: 理学院 浏览次数: 1047 [返回](#)

上海大学量子与分子结构国际中心 (ICQMS)、理学院物理系东方学者Mark Waller教授, 近日在国际顶级期刊Nature上发表了以上海大学为通讯作者单位的研究论文“Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI”。这是Mark Waller教授2016年3月全职加入上大以后, 设计指导整个项目并发表的一篇具有重大国际影响力的人工智能领域学术论文。

《Nature》是世界上最早的国际科技期刊, 自从1869年创刊以来, 始终如一地报道全球科技领域里最重要的突破。其办刊宗旨是“将科学发现的重要结果介绍给公众, 让公众尽早知道全世界自然知识的每一分支中取得的进展”。Mark Waller教授的文章发表在Nature上, 既证明了他国际级原创工作的广泛认可度, 也极其富于历史性意义, 是我校“双一流”建设道路上的里程碑式成果。



传统的化学合成路线设计一般采用被称为“逆合成分析”的策略, 把要合成的复杂目标分子拆分成若干小分子前体, 对前体再拆分, 不断进行, 直到达到实验室已有的化合物为止。Mark Waller教授应用计算机来辅助逆合成分析, 开发了新的计算预测系统。该系统采用蒙特卡洛树进行搜索, 并引入符号人工智能来寻找逆合成分析的路线。并且, 在蒙特卡洛树步骤中还引入了两种深度神经网络来提高计算精度与效率: 扩张决策网络用于寻找路径, 过滤网络用于对可能的逆合成路线进行初步筛选。用于训练神经网络的测试集包括了所有已经发表过的有机化学反应。经测试, Mark Waller教授开发出的分析系统比传统的计算机辅助法快30倍, 预测出的合成路线比传统计算机辅助法给出的多一倍, 还不需要任何其他经验或者假设。Mark Waller教授开发的逆合成分析系统的结果具有很高的专业水平, 在一个双盲的AB测试中, 大部分接受测试的化学家都认为, 分析系统生成的合成路线是与已经发表的文献等价的。

上海大学为建设国际一流大学的宏伟目标, 积极实施国际化战略, 力争使一批学科或学科方向达到国际一流水平。为了推进学校的新一期发展规划, 上海大学量子与分子结构国际中心 (<http://icqms.shu.edu.cn>) 在上海大学各职能部门的关心支持下, 在Jeffrey Reimers教授和任伟教授的主持下, 迄今为止已经在Nature, Nature Reviews Chemistry, PNAS, 以及物理、材料、化学、生物、纳米相关重要学术期刊PRL, JACS, Nano Letters, Adv.

Funct. Mater., PRB, APL等发表了一百三十多篇论文。

论文原文链接：<https://www.nature.com/articles/nature25978>

Mark Waller教授的研究网页<http://wallerlab.org/>

#### 快速链接

钱校长百年诞辰	日程安排	党务公开	信息公开
行政办公系统	招聘信息	上大志愿者	文明校园创建
非学历招生	海外学习与实习	国际会议	校报电子版
实验教学示范中心	语言文字	校医院	网站结构化调整



版权所有 © 上海大学 沪ICP备09014157 沪公网安备31009102000049号 地址：上海市宝山区上大路99号 邮编：200444 电话查询  
技术支持：上海大学信息化工作办公室 联系我们 管理登陆