

Eine Einführung in die Künstliche Intelligenz

Anwendungen wie „Siri“, „DeepL“ oder auch die Bilderkennung in autonomen Autos basieren auf aktuellen Methoden der Künstlichen Intelligenz und haben somit bereits Einzug in unseren Alltag gehalten. Die verwendeten Algorithmen können dabei komplexe Fragestellungen beantworten, indem sie die Lösungswege hierfür zuvor selbstständig gelernt haben (maschinelles Lernen) – eine problemspezifische Programmierung ist nicht notwendig. Die wichtigsten aktuellen Methoden basieren dabei auf den künstlichen Neuronalen Netzen, die der Funktionsweise des menschlichen Gehirns nachempfunden sind. Die gleichen Konzepte haben sich innerhalb der letzten 10–20 Jahre auch als wichtige Werkzeuge in den Naturwissenschaften etabliert.

Im Rahmen der Veranstaltung möchten wir Ihnen daher eine Einführung in neuronale Netze sowie deren Anwendungen in der pharmazeutischen Wirkstoffforschung und der Chemie geben. Dies umfasst sowohl die theoretischen Aspekte als auch die praktische Anwendung.

Darüber hinaus werden auch aktuelle Aspekte der *Data Science* betrachtet, um erste Einblicke in die Arbeitsabläufe bei der Nutzung künstlicher Intelligenz für wissenschaftliche Probleme zu erhalten.

Weiterführende Vorkenntnisse (auch Programmierkenntnisse) werden nicht benötigt.

Lehrplan

1. Eine Einführung in Neuronale Netze
 - Theorie und praktische Anwendung
 - Aktuelle Anwendungen: Bilderkennung, Spracherkennung und Textübersetzung
2. Neuronale Netze in der Pharmazie/Chemie/Wirkstoffforschung
 - Deskriptoren und Fingerprints als Molekülrepräsentationen
 - Die Geschichte der neuronalen Netze in der Chemie/Wirkstoffforschung
3. Aktuelle Anwendungen
 - *Deep Neural Networks* zur Toxizitätsvorhersage
 - *Recurrent Neural Networks/Autoencoders* zur Analyse des Chemischen Raums
 - *Graph Convolutional Networks* als alternative Eingabeform
4. Data Science Aspekte im Rahmen des maschinellen Lernens
 - Erzeugung qualitativ hochwertiger Daten
 - Extraktion, Prozessierung und Repräsentation von Moleküldaten

Die Veranstaltung wird im Rahmen eines Blockseminars vom Mo. 19.10 bis Do. 22.10.2020 angeboten. Für den 01.10.2020 ist auch noch eine kurze Einführungsveranstaltung geplant mit weiteren Details zu den Inhalten.

Dozenten: PD Dr. Oliver Koch und Mitarbeiter (Tag 1 bis 3), Prof. Dr. Frank Glorius und Mitarbeiter (Tag 4)

Weitere Informationen im Learnweb oder unter www.agkoch.de bzw. <https://www.uni-muenster.de/Chemie.oc/glorius/index.html>