

从机器学习到计算化学

机器学习

带来的技术革命波及甚广，然而将机器学习正确地引入到计算化学并不是一件容易的事情。报告人将机器学习分别与多尺度量子力学/分子力学方法、量子-经典混合非绝热动力学方法相结合，提升了现有计算方案的精度和效率；针对不同化学问题设计了不同类型的机器学习描述符，分别对非线性光学晶体的倍频特性和有机小分子的溶剂化自由能进行预测，为开展化合物的高通量虚拟筛选提供了新的计算工具。

报告人：申林，北京师范大学化学学院教授，博士生导师。2012年在北京师范大学获得博士学位，2012-2018年在香港大学和美国杜克大学从事博士后研究，2019年入选海外高层次人才计划；从事理论与计算化学领域的研究工作，主要发展和实现适用于复杂化学体系的计算方法，包括非绝热动力学模拟、机器学习等。探索各类化学反应特别是光电功能材料的微观机制。

10月14日 周五 9:30am 科研楼八层会议室