



Occam borotvája vagy gépi tanulás?

Természettudományos modellezés kevés vagy sok paraméterrel

Workshop

2024. március 7-8.

MTA Szegedi Akadémiai Bizottság
székháza, Szeged, Somogyi u.7.



Csütörtök, március 7.

- 11.00 Ferenczy György: Gépi tanulásos modellek a felfedező gyógyszerkutatásban, HUN-REN Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet
- 11.45 Nagy Brigitta: Mechanisztikus modellek és mesterséges neurális hálózatok összehasonlítása gyógyszerek kioldódásának előrejelzésében, BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
- 12.10 Galata Dorián: Mesterséges intelligencia alapú objektumfelismerés gyógyszer technológiai folyamatok valós idejű minőségellenőrzésében, BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
- 12.35 mini előadás, ebédszünet
- 13.40 Jakovác Antal: Miért egyszerű a tudomány? HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóintézet
- 14.25 Jedlovszky Pál: DMF modell parametrizálása vizes közegű szimulációkhoz szabadenergia számítások alapján, EKKE Élelmiszertudományi Intézet
- 14.50 Böcskey Zsolt: Szakmai életút, avagy egy öreg occamista alkonya a gépi tanulás fényében, (SANOFI)
15.15 szünet
- 15.30 Csendes Tibor: Mesterséges neuronhálók: álhírkeresés és verifikálás. SZTE TTIK Informatikai Intézet
- 16.15 Egedy Attila: Modellezés a vegyészmérnökségben, PE Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet
16.40 szünet
- 17.00 Jelasity Márk: Az általánosítás anomáliái a gépi tanulásban, SZTE TTIK Informatikai Intézet
- 17.45 Kovács Dániel: Tabulálástól átlagoláson át egy genetikus algoritmusig: a gépi tanulás beszivárgása a fehérje NMR spektroszkópia területére a random coil kémiai eltolódás predikción keresztül, ELTE Analitikai és BioNMR Laboratórium, ELTE Hevesy György Doktori Iskola
- 19.00 Közös vacsora az XXX vendéglőben

Péntek, március 8.

9.00 Héberger Károly: Occam borotvája ÉS gépi tanulás: kemometriai közelítés, a két statisztikai kultúra és a validálás hiánya a gépi tanulás esetén, HUN-REN Anyag- és Környezetkémiai Intézet

9.45 Tóth Gergely: ML modellek interpretációja, ELTE Kémiai Intézet

10.30 mini előadás, szünet

11.00 Rácz Anita: Gépi tanulás KNIME környezetben: példák a gyógyszer- és anyagtudomány területéről, HUN-REN Anyag- és Környezetkémiai Intézet

11.45 Hamza Andrea: Hogyan tervezzünk redox-aktív molekulákat gépi tanulással? HUN-REN Szerves Kémiai Intézet

12.10 Fehér Péter: Fotokatalizátorok redox erősségének becslése kombinált DFT+ML módszerrel, HUN-REN Szerves Kémiai Intézet

12.35 mini előadás, ebédszünet

13.50 Daru János: Potenciálisenergia-felületek illesztése gépi tanulás, vagy fizikai modellek segítségével, ELTE Kémiai Intézet

14.35 Győri Tibor: Reakciódinamikai potenciálok illesztése permutációra invariáns polinomokkal, aktív tanulás a Robosurfer programmal, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

15.00 Boda Dezső: Az egyszerű fizikai rendszerektől, a bonyolult fizikai rendszereken át a komplex rendszerekig, PE Természettudományi Központ

15.45 Zárszó

A workshop magyar nyelvű.

A részvétel ingyenes, nincs hivatalosan regisztrációhoz kötve, de a létszám tervezésében segít, ha részvételi szándékát emailben előre jelzi.

Az utazást és a szállást a résztvevők maguk intézik, a csütörtök esti vacsora önköltséges.

5 perces mini előadás tartására a helyszínen lehet jelentkezni. Poszter szekció nem lesz.

Szervezők:

Daru János (ELTE), Paragi Gábor (PTE, SZTE), Tóth Gergely (ELTE), SZAB KeMoMo szakcsoport

Email:

occamcontraml@gmail.com

Honlap:

<http://tothgergely.web.elte.hu/occamcontraml.htm>