

The 1st Joint Mini Workshop on Chemical Graph Learning



京都大学
総合生存学館
情報学研究科
未来智慧研究会
離散数理研究室



京都工芸繊維大学
情報工学
視覚情報研究室



Quaid-i-Azam
University
Pakistan

日時 Time :

Monday, 2pm-5:30pm, Jan 29th, 2024

会場 Venue :

Room 025, 京都大学東一条館 (Higashiichijo-Kan)

Program

14:00 – 14:05 Opening speech, Liang Zhao

Talks (Q&A included)

講演 1 / Talk 1 14:05 - 14:35 Yanghepu Li

De novo Drug Design against SARS-CoV-2 Protein Targets using SMILES-based Deep Reinforcement Learning

講演 2 / Talk 2 14:35 - 15:05 AZAM, Naveed Ahmed

Inferring Compounds With Given Aqueous Solubility

講演 3 / Talk 3 15:05 - 15:35 TAKEKIDA, Mao

Inference of Chemical Compounds with Desired Multiple Chemical Properties by Integer Programming and Machine Learning

Break: 15:35 – 15:50

講演 4 / Talk 4 15:50 – 16:20 成田 光伸 (Narita Koshin)

フラグメント分割と化学構造記法を用いた化合物の共通部分構造抽出

講演 5 / Talk 5 16:20 - 16:50 碓井 響子 (Usui Kyoko)

フラグメント分割による化合物の近似共通部分構造の探索

Group photo: 16:50 – 17:00

Meeting: 17:00 – 17:30

<https://aw.gsais.kyoto-u.ac.jp/activities/wcgl-20240129>

