

Rationalizing Multi-Target Activities of Small Molecules through Explainable Machine Learning

Prof. Jürgen Bajorath

University of Bonn, Germany



日時: 令和5年3月3日(金) 15:30~

場所: 化学生命科学研究所 R1棟 第1会議室

Bajorath先生は、AI創薬分野において様々なツールを開発されている著名な先生で、論文数は770報を超えています。本講演では、創薬研究において、ポリファーマコロジーの基礎となる低分子化合物のマルチターゲット(MT)活性が、しばしば望ましくない副作用の原因ともなることに焦点を当て、説明可能な機械学習によるMT活性の合理化に関するご研究についてご紹介いただきます。奮ってご参加ください。

参考論文: *J. Comput. Aided Mol. Des.* (2022) 36:363. *Future Med. Chem.* (2022) 14:1171.

問い合わせ先: 中村浩之 内線5244