

A U S H A N G

FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

DISPUTATION

Freitag, 25.08.2023, 15:00 Uhr

Ort: WebEx

Disputation über die Doktorarbeit von

Herrn Jan Robin Winter

Thema der Dissertation:

Unsupervised Learning of Molecular Representations for Drug Development

Thema der Disputation:

Machine Learning for Molecular Property Prediction and Optimisation in Drug Discovery

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. F. Noé** durchgeführt.

Abstract: Developing pharmaceutical drug candidates involves a substantial commitment of time and resources. A major task in the early stage of Drug Discovery is finding molecules that have desirable properties (e.g., high binding affinity to the biological target of interest).

In the first part of this talk, I will discuss how Machine Learning can be used to accelerate this process by either predicting such properties for a given molecule or to directly propose novel drug candidates with desirable properties. In the second part I will present the results of my thesis, exploring how Unsupervised Machine Learning can improve such methods by extracting expressive representations of molecular entities.

Die Disputation besteht aus dem o. g. Vortrag, danach der Vorstellung der Dissertation einschließlich jeweils anschließenden Aussprachen.

Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen

Der Vorsitzende der Promotionskommission
Prof. Dr. F. Noé