

Einladung zum ICP-Kolloquium (Präsenzveranstaltung)

Prof. Dr. Mathias Niepert
Institut für Parallele und Verteilte Systeme
Universität Stuttgart

hält am

Montag, 24.07.2023, 14:00 Uhr
ICP Seminarraum 1.079, Allmandring 3

einen Vortrag über das Thema:

“Combining 2D and 3D message passing neural networks for molecular property prediction”

Abstract:

The talk will give a brief introduction to graph neural networks and equivariant message passing neural networks. We will then present recent work on combining graph representations (explicitly modeling covalent bonds) and 3D representations of atomistic systems for predicting properties such as solubility.

Interessenten sind herzlich eingeladen.

Prof. Dr. C. Holm
Dr. Rudolf Weeber
Dr. Alexander Schlaich