

異分野融合ワークショップ 『データ科学との融合による化学の新展開』

2018年3月13日(火)～14日(水)
於 奈良先端科学技術大学院大学
物質創成科学研究科棟1階 小講義室F105

参加費無料 懇親会費 一般：2000円／学生：無料
参加希望者は、下記問い合わせ先までご連絡下さい（当日参加も可）

プログラム

3月13日(火)

- 13:00-13:05 開会挨拶
- 13:05-13:45 **作村 諭一 (NAIST)**
「膜電位時系列を用いた細胞内シグナル経路推定」
- 13:45-14:25 **本郷 研太 (JAIST・JSTさきがけ)**
「第一原理計算の進展とインフォマティクスとの融合展開」
- 14:25-14:45 休憩
- 14:45-15:25 **山西 芳裕 (九州大学・JSTさきがけ)**
「AI創薬：多様な疾患に対するデータ駆動型の新薬開発」
- 15:25-16:05 **瀧川 一学 (北海道大学・JSTさきがけ)**
「分子のグラフ表現と機械学習」
- 16:05-16:25 休憩
- 16:25-17:05 **吉田 亮 (統計数理研究所)**
「物質構造の表現・学習・生成・合成」
- 17:05-17:45 **小林 正人 (北海道大学・JSTさきがけ)**
「反応経路探索とインフォマティクス：触媒・表面吸着系計算への応用」
- 17:45-18:25 **畑中 美穂 (NAIST・JSTさきがけ)**
「反応経路自動探索：機械学習による高効率化を目指して」
- 18:30-20:30 懇親会（融合棟2号館2階 大学会館特別会議室）

3月14日(水)

- 9:30-10:10 **小野 直亮 (NAIST)**
「グラフ畳み込みネットワークを用いたアルカロイド化合物の代謝パスウェイの分類」
- 10:10-10:50 **金子 弘昌 (明治大学)**
「データ駆動型モデルの適用範囲を考慮して効率的に分子設計・材料設計する方法」
- 10:50-11:10 休憩
- 11:10-11:50 **観山 正道 (東北大学)**
「スパースモデリングをもちいたSTMトポグラフィデータの解析」
- 11:50-12:30 **小原 真司 (NIMS・JSTさきがけ)**
「実験・理論・先端数理学の融合によるガラス科学の進化と深化」
- 12:30-12:35 閉会挨拶