

第5回 理研-北大-産総研-物材機構

「触媒インフォマティクス」シンポジウム

— 知の融合が加速する触媒研究 —

2019年 **11月12日** (火)

13:00 ~ 17:15

12:30 受付開始 / 懇親会 17:30~19:00

イノカンファレンスセンター
Room A (東京都千代田区内幸町 2-1-1)

ものづくりの基盤を支える「触媒研究」は我が国の強みです。触媒化学と情報科学を融合する「カタリストインフォマティクス」という概念のもと、4機関合同で開催してきたシンポジウムも今回で第5回を数えます。人工知能による技術革新は目覚ましく、あらゆる研究分野で人工知能を採り入れた研究が進んでいます。触媒化学とともに、高分子化学、医療・創薬等の分野における研究の最前線に触れ、今後の触媒研究にどのように生かすか、を議論します。

入場無料

懇親会費 ¥5,000
(当日徴収)

参加登録



締切: 10月31日

開会挨拶

13:00 小寺 秀俊 (理化学研究所)

招待講演

13:10 中嶋 隆人 (理化学研究所 計算科学研究センター)
シミュレーションとインフォマティクスの融合による新材料設計 - 富岳に向けて -

13:55 奥野 恭史 (京都大学大学院医科学研究科 / 理化学研究所)
創薬化学からみる AI の現状と可能性

講演

15:10 永田 賢二 (物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門)
アンサンブル学習を利用したスパースモデリング

15:35 石原 司 (産業技術総合研究所 バイオメディカル研究部門)
高機能分子の自動探索 ~ 自動設計と自動合成の融合による高機能分子発見の自動化へ ~

16:00 山口 滋 (理化学研究所 環境資源科学研究センター)
有機合成におけるデータ駆動型分子触媒設計の現状

16:20 伊藤 研悟 (理化学研究所 環境資源科学研究センター)
AI と演繹的 NMR による分子複雑系のマルチスケール構造・物性解析

16:40 鳥屋尾 隆 (北海道大学 触媒科学研究所)
機械学習を用いた固体触媒研究

閉会挨拶

17:05 長谷川 淳也 (北海道大学 触媒科学研究所)



主催



理化学研究所



北海道大学



産業技術総合研究所



物質・材料研究機構



協賛

日本化学会

触媒学会

有機合成化学協会



お問い合わせ

国立研究開発法人理化学研究所

環境資源科学研究センター シンポジウム事務局

Email: csrs@riken.jp