FS-26

日時: 2019 年 10 月 24 日 14:00-15:00
場所: 407

「医薬品研究と ADMET」分野
Selected Oral Presentations
(Information and computing approach for drug design and ADMET study)

モデレーター: **瀧本 征佑** Seisuke Takimoto
日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所
Central Pharmaceutical Research Institute, JAPAN TOBACCO INC.

渡邊 怜子 Reiko Watanabe
医薬基盤・健康・栄養研究所 AI 健康・医薬研究センター
AI Center for Health and Biomedical Research,
National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

口頭発表演題（1演題 20 分:発表 15 分、質疑 5 分）

1. [P5-12] Cluster Gauss-Newton method for efficiently estimating multiple sets of parameters: Application to Physiologically-Based PharmacoKinetic models
   速水 謙 Ken Hayami
   国立情報学研究所, 総合研究大学院大学
   National Institute of Informatics, SOKENDAI

2. [P5-13] Prediction of Health Effects of Food Peptides and Elucidation of The Mode-of-action Using Multi-task Graph Convolutional Neural Networks
   福永 一貴 Itsuki Fukunaga
   九州工業大学
   Kyushu Institute of Technology

3. [P5-15] Free Energy Landscapes of Cyclic Hexapeptide Diastereomers by Multicanonical Molecular Dynamics Simulations
   小野 聡 Satoshi Ono
   田辺三菱製薬株式会社
   Mitsubishi Tanabe Pharma Corporation