

### 第三回ケモインフォマティクス若手の会

主催: 日本化学会 情報化学部会

スポンサー: オープンアイ・ジャパン株式会社

協賛: CAC フォーラム

会期: 2015年10月7日(水) (当日 18:00 から懇親会)

会場: 東京大学 山上会館

〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

Tel: 03-3818-3008

東大へのアクセス: [http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/map01\\_02\\_j.html](http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/map01_02_j.html)

山上会館へのアクセス: [http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01\\_00\\_02\\_j.html](http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01_00_02_j.html)

ケモインフォマティクス分野の若手研究者の方々の活性化および研究者間の交流増加の促進を目的とした若手の会が発足してから、第三回目の若手の会を迎えました(前回の若手の会の様子については [https://www.jstage.jst.go.jp/article/cicsj/33/1/33\\_21/pdf](https://www.jstage.jst.go.jp/article/cicsj/33/1/33_21/pdf) をご覧ください)。第三回若手の会では、ケモインフォマティクスの基礎を勉強するだけでなく、発表をいただいた方々と多くのディスカッションができるようにしました。また最後には、長年に渡りケモインフォマティクス分野を牽引された船津教授より、今後のケモインフォマティクスや若手に期待することについてのお話をいただきます。ぜひ、参加と発表の検討をお願いします。研究成果のみならず、ケモインフォマティクスに求めること、直面している問題・課題などといった幅広い内容の発表を歓迎します。

スケジュール:

・10月7日(水)

10:00 – 10:10 開会の挨拶

金子 弘昌 氏 (東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻・助教)

10:10 – 11:10 化合物構造情報の記述子などへの変換から統計解析手法まで

山崎 広之 氏 (北里大学薬学部 薬学教育研究センター 情報薬学部門・助教)

[概要]

コンピュータで化合物情報を解析するために、化合物の構造情報をフィンガープリントや構造記述子などへと変換することは重要な工程である。このような変換された構造情報を用いることによって、特に生命科学や創薬化学では、ビッグデータからの情報抽出を行い新たな知見を得ることや、既知化合物を学習することによって新規化合物の活性、物性、毒性などの予測を行うことなどができる。本講演では、始めにフィンガープリントなどの表記法の種類や変換方法を紹介し、続けて古典的な統計解析手法からランキング手法などの最近の創薬研究でも用いられるようになってきた新規の統計解析手法を含めて紹介していきたい。

11:10 – 12:20 ショートプレゼンテーション

[概要]

各人 3 分程度でショートプレゼンテーションを行う。しっかりとした成果が出ている発表でなくても構わない(むしろ歓迎)。特に企業の方の、ケモインフォマティクスに求めること、といった内容など幅広い内容のプレゼンを歓迎する。午後はテーマごとにグループに別れ、グループごとにディスカッションする。学生を始め多くの若手研究者のプレゼンを歓迎する。

12:20 – 13:20 ランチョンセミナー

オープンアイ・ジャパン株式会社よりお弁当をご用意していただきます。

13:20 – 13:30 会場準備

13:30 – 15:00 グループディスカッション①

15:00 – 15:10 休憩

15:10 – 16:40 グループディスカッション②

[概要]

プレゼンをした方々をいくつかのグループに分け、参加者は希望するグループに入りディスカッションを行う。休憩後に参加者はグループを変え、同様にディスカッションを行う。

16:40 – 16:50 会場準備

16:50 – 17:30 我々の時代が来る ～データ集約型科学研究の予感～

船津 公人 先生 (東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻・教授)

[概要]

科学研究の手法として第4パラダイムが提唱されている。第1パラダイムは「経験・実験的手法」、第2パラダイムは「観測データ群を分析し、その背後にある論理・法則を見いだしていく方法」、第3パラダイムは「計算機シミュレーションにより解決することを目指した方法」、そして第4の科学は「大量のデータをもとに統計的な推論モデルにより科学を展開することを目指して提案されたデータ集約型の方法」である。化学分野に目を移しても、その発展とともに膨大なデータが蓄積され、いまでも生産されている。私たちはその上に立って何を考えながら効率的に新しい材料開発などの研究を進めていくかが問われている。我々にはその準備は十分にできているのだろうか？このための研究領域(ケモインフォマティクス)の動きはいま始まったわけではない。ケモインフォマティクスの創成期から現在に至る考え方の変遷を概観し、この先我々が考えるべきこと、成すべきことを見つめたい。その結果、まさに我々の時代が来つつあることを確認したい。

17:30 – 18:00 移動

18:00 – 20:00 懇親会 (時間は変更になる場合があります。その場合は再度連絡します。)

場所: 東京周辺 (詳細については追って連絡します。)

参加費: 無料 (オープンアイ・ジャパン株式会社よりお弁当をご用意していただきます)

\*若手の会の参加費とケモインフォマティクス討論会の参加費とは別ですのでご注意ください

参加者がくつろいで交流や議論を楽しむことを目指しています。

当日はラフな服装で参加してください (ノーネクタイをお願いします)。

参加登録: 参加およびショートプレゼンを希望する方は、2015年8月28日(金)までに以下のメールアドレスまで参加登録をお願いします。その際に下記の情報を明記してください。

- ・氏名
- ・所属
- ・メールアドレス
- ・電話番号
- ・ショートプレゼンの希望の有無
- ・懇親会参加の有無

(ショートプレゼンを希望する場合)

- ・タイトルおよび概要(150字くらい)

\*当日はショートプレゼン用のパワーポイントのスライドおよびグループディスカッション用の紙媒体の資料をご準備ください。

申込みは締切を過ぎても柔軟に対応します。遠慮せずご連絡ください。

問合せ・参加申込み連絡先:

東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 金子弘昌

E-mail: [hkaneko@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:hkaneko@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp)

Tel: 03-5841-8837