

第41回 ケモインフォマティクス討論会 プログラム

1日目 【A会場】 特別講演、招待講演、口頭発表、ポスター発表

2日目 【B会場】 口頭発表、招待講演

【C会場】 口頭発表

発表種別 口頭発表 A講演（質疑込 25分）、B講演（質疑込 15分）

ポスター発表（発表時間 80分+ショートプレゼンテーション 2分/件）

1日目 (10/26)

【A会場】

(9:30-10:50) セッション A1

1A01 (B講演) 水谷紗弥佳¹, E. Pauwels^{2,3}, V. Stoven^{2,3}, 五斗進⁴, ○山西芳裕^{5,6} (1東工大生命理工, 2キュリー研, 3パリ国立高等鉱業, 4情報・システム研, 5九工大, 6JST さきがけ)

「標的分子を考慮した医薬品化合物の副作用プロファイルの予測」

1A02 (B講演) ○堀憲次 (山口大院創成科学)

「遷移状態データベースを利用した多数の薬候補化合物合成反応の解析」

1A03 (A講演) ○金谷重彦, 森田晶, 大橋美奈子, 江口遼平, Altaf-Ul-Amin, 黄銘, 小野直亮 (奈良先端大)

「KNAPsAcK Family DB: 天然物データベースにおける化学構造類似検索とその他の情報検索」

1A04 (A講演) ○田中るみ子¹, 中山伸一² (1筑波大院図情メディア, 2筑波大院図情メディア系)

「特許公開公報文章からの化学物質名の切出しと選別法の検討」

(11:10-11:50) ポスター発表 ショートプレゼンテーション

(11:50-12:10) 日本化学会ケモインフォマティクス部会総会

(12:10-13:10) 昼休み

(13:10-14:30) ポスター発表

1P01 ○薛晶勳¹, 田中健一¹, 澤津橋徹哉², 梶伸之介², 船津公人¹ (1東大院工, 2三菱重工)
「発電プラント系統水を対象とした不純物濃度のオンライン予測」

1P02 ○加藤涼太, 田中健一, 小寺正明, 船津公人 (東大院工)

「原子座標を用いた化合物の物性予測手法」

1P03 ○佐方冬彩子¹, 小寺正明¹, 田中健一¹, 中野博史², 浮田昌一², 白沢楽², 富谷茂隆², 船津公人¹ (1東大院工, 2ソニー)

「無機材料の組成式を元にした物性予測のための記述子開発」

1P04 ○鈴木天音, 田中健一, 小寺正明, 船津公人 (東大院工)

「深層生成モデルを利用した新規医薬品構造提案手法の開発」

1P05 ○西村拓朗, 船津公人 (東大院工)

「パーソナル版, 合成経路設計システム AIPHOS の開発」

1P06 ○藤波美起登¹, 清野淳司^{2,3}, 中井浩巳^{1,2,4} (1早大先進理工, 2早大理工総研, 3JST さきがけ)

- け, ⁴京大 ESICB)
「反応予測に寄与する量子化学的記述子の解析」
- 1P07 ○前川原大貴¹, 藤波美起登¹, 清野淳司^{2,3}, 一色遼大¹, 山口潤一郎¹, 中井浩巳^{1,2,4} (¹早大先進理工, ²早大理工総研, ³JST さきがけ, ⁴京大 ESICB)
「有機反応における高い収率を与える溶媒のデータ科学的探索」
- 1P08 ○中村海里¹, 清野淳司^{2,3}, 中井浩巳^{1,2,4} (¹早大先進理工, ²早大理工総研, ³JST さきがけ, ⁴京大 ESICB)
「インフォマティクスを用いた結合エネルギー密度解析手法の開発」
- 1P09 ○寺前裕之¹, 玄美燕², 山下司², 高山淳², 岡崎真理², 坂本武史² (¹城西大理, ²城西大薬)
- 1P10 ○南拓也^{1,3}, 川田正晃², 藤田俊雄^{1,3}, 室伏克己³, 内田博³, 大森和弘³, 奥野好成³ (¹ADMAT, ²AIST, ³昭和電工)
「原料分類と機械学習を活用した熱硬化性樹脂物性予測」
- 1P11 ○斎藤雅史¹, 蒲池高志², 辻雄太¹, 吉澤一成¹ (¹九大先導研, ²福工大工)
「合金表面上におけるメタン活性化の触媒インフォマティクス」
- 1P12 ○小関準¹, 今野雅允¹, 浅井歩¹, 松井秀俊², 佐藤太郎¹, 土岐祐一郎¹, 森正樹¹, 石井秀始¹ (¹阪大院医, ²滋賀大)
- 1P13 ○山口徹^{1,2}, 村藤俊宏², 隅本倫徳², 山崎鈴子², 堀憲次² (¹TS テクノロジー, ²山口大院創科)
「深層学習 (GCNN) による色素系増感剤のモデル化と性能予測」
- 1P14 ○三木伸一¹, 重光保博¹, 務台俊樹² (¹長崎工技セ, ²東大生研)
「ヒドロキシフェニルイミダゾ[1,2-a]ピリジン誘導体の集積構造依存発光特性と2分子間相互作用に関する理論的研究」
- 1P15 ○沓脱拓郎¹, 杉本学² (¹熊本大工, ²熊本大院先端)
「DFTB 法による FAU ゼオライトの pKa 値の予測」
- 1P16 ○石出愛実¹, 杉本学² (¹熊本大工, ²熊本大院先端)
「β ラクタム系抗菌剤に関する電子状態インフォマテクス研究」
- 1P17 ○井手尾俊宏¹, 杉本学² (¹熊本大院自然, ²熊本大院先端)
「量子化学計算を用いた脂肪酸合成酵素阻害剤に関するケモインフォマテクス研究」
- 1P18 ○森脇寛智, 渡邊千鶴, 本間光貴 (理研 BDR)
「MOE 用 FMO 前処理, 解析ライブラリの作成」
- 1P19 ○曾谷亮太, 田中健一, 船津公人 (東大院工)
「電子エネルギー損失分光法スペクトルを対象とした元素分布定量化手法の開発」

(14:40-15:05) 招待講演 1

- 1T01 (A 講演) ○旭良司 (豊田中研)
「機械学習ポテンシャルを用いた大規模計算手法: 触媒およびイオン伝導体への活用」

(15:05-16:10) セッション A2

- 1A05 (B 講演) ○高橋崇宏¹, 土屋諒介¹, 荒川正幹² (¹静岡大, ²宇部高専)
「化学気相堆積法における多目最適化手法に基づく自動実験計画法の開発」

- 1A06 (A 講演) ○宮尾知幸¹, 船津公人^{1,2} (¹奈良先端大, ²東大院工)
「リガンドベースのヴァーチャルスクリーニングにおけるコンフォメーションの影響
とアンサンブル効果について」
- 1A07 (A 講演) ○勝田陽介¹, 井上舞美¹, 嘉村匠人¹, 北村裕介¹, 萩原正規², 佐藤慎一³, 井原
敏博¹ (¹熊本大院先端, ²弘前大理工, ³京大化研)
「細胞内特殊核酸の同定法の開発」

(16:30-17:20) 特別講演 1

- 1S01 ○萩原正敏 (京大院医)
「遺伝病治療に向けて低分子化合物で pre-mRNA スプライシングを操作する」

(17:30-18:20) 特別講演 2

- 1S02 ○浅井美博 (産総研)
「計算シミュレーションとデータ科学を活用する材料・反応設計」

(18:30-20:30) 懇親会 (熊本市民会館 勸業館食堂)

2 日目 (10/27)

(* 一部の時間帯を、B 会場と C 会場のパラレルセッションで実施)

【B 会場】

(9:00-10:15) セッション B1

- 2B01 (B 講演) ○澤田隆介¹, 岩田通夫², 梅崎雅人³, 臼井義比古³, 小林敏一³, 窪野孝貴³, 林周
作³, 門脇真³, 山西芳裕² (¹九大生体防御医研, ²九工大院情報工, ³富山大和漢医薬
学研)
「漢方薬リポジショニング: ビッグデータと機械学習による漢方薬の効能予測」
- 2B02 (B 講演) ○Francois Berenger, Yoshihiro Yamanishi (九工大)
「Combining a bisector tree with the Tanimoto distance for similarity
searches and beyond」
- 2B03 (B 講演) ○森川郁美¹, 荒川正幹², 太田広人³, 杉本学³ (¹熊本大院自然, ²宇部工専, ³熊本
大院先端)
「電子状態インフォマティクスによる生体アミン受容体アンタゴニストの探索」
- 2B04 (B 講演) ○金子晶夫, 後藤仁志 (豊橋技科大)
「QSAR のための立体配座データベースの構築」
- 2B05 (B 講演) ○鈴木天風, 後藤仁志 (豊橋技科大)
「配座異性体データベースを活用した粗視化ペプチドの全原子構造予測」

(10:35-11:40) セッション B2

- 2B06 (B 講演) 原田隆平, ○重田育照 (筑波大学計算セ)
「データ駆動型分子動力学法による構造細密化と遷移構造探索」
- 2B07 (A 講演) ○黄銘, 江口遼平, 小野直亮, Altaf-Ul-Amin, 金谷重彦 (奈良先端大)
「in-silico モデルを使った化合物の心臓毒性の予測」
- 2B08 (A 講演) ○江口遼平, 黄銘, 小野直亮, Altaf-Ul-Amin, 金谷重彦 (奈良先端大)
「グラフ畳み込みネットワークを用いたアルカロイド代謝予測」

(11:40-12:50) 昼食

(12:50-14:05) セッション B3

2B09 (A 講演) ○岩田通夫¹, Yuan Longhao², Zhao Qibin², 田部井靖生², 山西芳裕¹ (¹九工大, ²理研 AIP)

「Tensor-train 分解アルゴリズムによる薬物応答遺伝子発現データからの創薬」

2B10 (A 講演) ○陳嘉修, 田中健一, 小寺正明, 船津公人 (東大院工)

「How can we trust QSPR models?: Ideas on building interpretable machine learning methods」

2B11 (A 講演) ○井上貴央, 田中健一, 小寺正明, 船津公人 (東大院工)

「生成構造の多様化を目指した化学空間探索型構造生成アルゴリズムの改良」

(14:15-14:35) 招待講演

2T01 ○白井泰博 (日本 HP)

「計算科学やインフォマティクス研究を加速する計算機の現状と今後の動向」

(14:35-15:35) 若手連携セッション 1 (招待講演)

2Y01 ○大平詩野 (富士フィルム)

「アミノ酸との相互作用マッピング (AAM) 記述子に基づいたヒット/リード化合物の骨格
改変法の開発」

2Y02 ○芹沢貴之 (旭化成ファーマ)

「旭化成ファーマにおける AI/機械学習の創薬研究への活用」

2Y03 ○竹下潤一 (産総研)

「インビボ毒性試験データベースを用いたラット反復投与毒性のインシリコ予測」

(15:50-16:50) 若手連携セッション 2 (招待講演)

2Y04 ○J. B. Brown (京大院医)

「能動的学習による化合物モデリング, および, 導かれた機械学習の真実」

2Y05 ○小寺正明 (東大院工)

「天然物生合成と環境物質代謝のケモインフォマティクス」

2Y06 ○三戸邦郎 (日化)

「計算化学とともに四半世紀 ~次代を担う若人へのメッセージ~」

(16:50-17:10) 講演賞・ポスター賞 授賞式

(17:10) 閉会

【C会場】

(9:00-10:15) セッション C1

2C01 (B 講演) ○重光保博^{1,2}, 大賀恭³ (¹長崎工技セ, ²長崎大院工, ³大分大理工)

「非平衡溶媒和自由エネルギーの液相反応機構への関与」

2C02 (B 講演) ○蔵本裕哉^{1,2}, 赤瀬大^{1,2}, 相田美砂子^{1,2} (¹広島大院理, ²広島大 QuLiS)

「TMAO により誘発されるその周囲の水の特異性に関する理論化学的研究」

2C03 (B 講演) ○諏訪志典¹, 川嶋裕介¹, 川下理日人², 藤居由基¹, 田雨時¹, 藤岡弘道¹, 有澤光
弘¹, 高木達也¹ (¹阪大院薬, ²近大理工)

「含窒素多環芳香族化合物に対する量子化学計算を用いた吸光波長予測に関する検討」

2C04 (B 講演) ○仲澤英祐, 増岡大起, 鈴木健太, 高橋崇宏 (静岡大)

「CVD 法における成膜速度分布厳密解の導出とハイスループット自動解析への応用」

2C05 (B 講演) ○田中大佑生¹, 杉本学² (¹熊本大院自然, ²熊本大院先端)

「電子状態インフォマティクスによるペロブスカイト太陽電池用ホール輸送材料の探索」

(10:35-11:40) セッション C2

2C06 (B 講演) ○井上貴文¹, 杉本学² (¹熊本大院自然, ²熊本大院先端)

「分子軌道の形状類似性評価手法の開発」

2C07 (A 講演) ○林亮子 (金工大)

「データ科学と計算科学の協働による分子設計を目指して」

2C08 (A 講演) ○菅原悠樹¹, 小寺正明¹, 田中健一¹, 中野博史², 浮田昌一², 白沢楽², 富谷茂隆², 船津公人¹ (¹東大院工, ²ソニー)

「アンサンブル学習を利用した発光波長予測」

(11:40-12:50) 昼食

(12:50-14:00) セッション C3

2C09 (A 講演) ○吉村誠慶¹, 荻原陽平², 坂井教郎², 畑中美穂^{1,3} (¹奈良先端大, ²東理大, ³JST さきがけ)

「反応経路自動探索法を用いた触媒的分子内環化の反応機構に関する研究」

2C10 (B 講演) ○宮崎文¹, 畑中美穂² (¹奈良先端大物質創成, ²奈良先端大研究推進機構, ³JST さきがけ)

「不斉希土類 N, N' - ジオキシド誘導体を触媒とするマイケル付加反応の立体選択性発現 機構の解明」

2C11 (B 講演) ○影山棕¹, 清野淳司^{2,3}, 藤波美起登¹, 五十幡康弘², 中井浩巳^{1,2,4} (¹早大院先進理工, ²早大理工総研, ³JST さきがけ, ⁴京大 ESICB)

「機械学習を用いた Orbital-free 密度汎関数理論計算手法の開発」

2C12 (B 講演) ○福島真太郎¹, 本山裕一², 吉見一慶² (¹トヨタ IT 開発セ, ²東大物性研)

「敵対的生成ネットワークによる逆合成の経路探索」

(以降の時間帯は、B 会場にて実施)