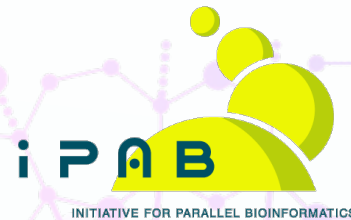


2024年度 第1回 IPABセミナー

「創薬情報研究の最前線」



文部科学省 科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A)
天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く
生物活性分子デザイン

主催：特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ (IPAB)

共催：文部科学省 科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A) 「天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く生物活性分子デザイン」

IPAB創薬情報WGでは、スーパーコンピューターに代表される並列情報処理の重要な応用として挙げられる創薬支援について、最新の情報提供や会員の交流を目指しています。特に、近年の深層学習に代表される機械学習・AI技術の発展は、並列情報処理技術の向上も相まって、化合物情報の学習や予測、新規構造提案などの分子設計への応用が進んでいます。我が国の大型科研費プロジェクトである学術変革領域研究(A)にも、創薬情報処理に関連した新規領域が目立つようになりました。本年度第1回のIPABセミナーでは、2023年度に発足した学術変革領域研究(A)「天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く生物活性分子デザイン」領域 (<https://latent.chemical.space>) に参画する情報系研究者による、創薬情報研究の最前線を紹介します。

15:00～15:10	大上 雅史 (東京工業大学 情報理工学院 准教授／IPAB理事)
15:10～15:35	海東 和麻 (名古屋大学大学院 情報学研究科 特任助教)
15:35～16:00	林 周斗 (東京医科歯科大学 難治疾患研究所 准教授)
16:00～16:25	関嶋 政和 (東京工業大学 情報理工学院 准教授)
16:30～16:50	IPAB総会
17:00～	懇親会 (東京工業大学つばめテラス、会費2,000円)

「企画趣旨説明」

「化学空間の歩き方 ～機械学習による化合物設計の試み～」

「AIとロボットによる自律駆動型タンパク質設計」

「潜在空間を用いた化合物生成手法の開発」

2024年 5月 30日(木) 15:00～



申込み <https://forms.gle/4DC7p1UfqfZqYckw7>

参加費無料 (懇親会費2,000円)

会場 東京工業大学 大岡山キャンパス 西8号館10階大会議室

問合せ IPAB創薬情報WG 大上 雅史 (ohue@c.titech.ac.jp) URL: <http://www.ipab.org>

