

第 8 回ケモインフォマティクス若手の会

主 催：日本化学会 ケモインフォマティクス部会

会 期：2018 年 10 月 25 日(木)13:00 - 18:20

会 場：熊本市民会館（〒860-0805 熊本県熊本市中央区桜町 1 番 3 号）

ホームページ：<https://chemo-wakate.connpass.com/>

【討論主題】

- (1) ケモインフォマティクス(実験系, 理論系を含む)
- (2) マテリアルズインフォマティクス(実験系, 理論系を含む)
- (3) バイオインフォマティクス(実験系, 理論系を含む)
- (4) 計算機化学(計算機および IT 機器を利用した化学関連の研究)
- (5) 計算化学
- (6) 理論化学
- (6) 関連する化学教育・学習システム

* 理学・工学を問いません。

【プログラム】

- ・ 13:30～15:00:チュートリアルセッション
 - JB Brown 先生(京都大学医学研究科)「化合物データ解析及びモデリング可視化の基礎」(Fundamentals of analyzing chemical data and visualization of modeling)
 - 芹沢貴之先生(旭化成ファーマ株式会社)「創薬への AI の活用」(An introduction to the use of machine learning (AI) for drug discovery)
 - 森脇寛智 先生(理化学研究所)「RDKit チュートリアル」(RDKit tutorial)
- ・ 15:00～15:10:休憩
- ・ 15:10～15:50: Group Discussion 1
 - チュートリアルセッションの内容を踏まえ、【討論主題】に関連する話題の中から、参加者が日頃から疑問に思っていることや議論したいトピックを複数個決める(1 グループあたり 3～6 人程度になるように)。
 - 参加者は興味のあるトピックを議論するグループに分かれる。
 - グループごとにトピックについて議論を行い、議論した内容を 1～2 枚のスライドにまとめる。
- ・ 15:50～16:20: Group Discussion 1 発表

- グループごとに議論した内容を発表し、グループ間で知識共有と意見交換を行う。
- ・ 16:20～16:30: 休憩
- ・ 16:30～17:10: Group Discussion 2
 - Group Discussion 1 と同じ要領で、異なるトピックに対してグループに分かれてグループディスカッションを行い、議論した内容を 1～2 枚のスライドにまとめる。
- ・ 17:10～17:40: Group Discussion 2 発表
 - グループごとに議論した内容を発表し、グループ間で知識共有と意見交換を行う。
- ・ 17:40～17:50: 休憩
- ・ 17:50～18:20: Group Discussion まとめ/明日の討論会にむけて
- ・ 18:20: 解散

【参加登録および参加費】

参加費は 1,000 円です。参加費用は当日受付にて現金でお支払いください。若手の会の事前予約は以下のサイトより必要事項をご記入の上お申し込みください(討論会への事前予約は別途必要です)。

<https://chemo-wakate.connpass.com/>

【懇親会】

オフィシャルな懇親会は行いません。

【連絡先】

ケモインフォマティクス若手の会

実行委員長 J.B. Brown(京都大学) jbbrown@kuhp.kyoto-u.ac.jp

実行副委員長 小寺正明(東京大学) maskot@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp