

第 39 回ケモインフォマティクス討論会プログラム

主催：日本化学会情報化学部会

共催：日本薬学会、日本農芸化学会、日本分析化学会、日本コンピュータ化学会

日程：2016年9月29日（木）～9月30日（金）

場所：静岡大学浜松キャンパス佐鳴会館（静岡県浜松市中区城北 3-5-1）

アクセス：<http://hama.shizuoka.ac.jp/pages/access/>

事前参加登録締切：9月2日（金）（詳細は討論会ホームページをご覧ください。）

原稿提出締切：8月4日（金）

討論会ホームページ：<http://cicsj.chemistry.or.jp/sympo/39/>

一般講演番号の右上の*は講演時間 25 分（質疑 5 分を含む）を表します。それ以外の一般講演は 15 分。若手セッションは各 20 分です。

9月29日（木）

[1] 量子科学のフロンティアのセッション

（座長 重光保博）

- 10:00 O1* 量子化学計算とインフォマティクス技術を用いた反応予測システムの開発
（早大先進理工）○藤波美起登・（早大理工研）清野淳司・（早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB）中井浩巳
- 10:25 O2 QMRDB を応用した遷移状態データベース (TSDB) の構築Ⅲ — TSDB を利用した置換基法と関連するプログラム開発 —
（山口大院創成科学）○堀憲次
- 10:40 O3 2-アザスピロ環化合物における閉環反応の理論的研究
（城西大理）○寺前裕之・（城西大薬）林浩輔・高山淳・坂本武士
- （座長 堀憲次）
- 10:55 O4* ダイキューブ水 12 量体：水素結合ネットワークの網羅と分類
（広島大院理、広島大 QuLiS）○赤瀬大・相田美砂子
- 11:20 O5 6 族元素の鉱物表面への吸着構造に基づく同位体分別の解析
（東大院理）○田中雅人・（広島大院理）有賀大輔・（海洋研究開発機構）柏原輝彦・（東大院理）高橋嘉夫
- 11:35 O6 トレハロースの構造と安定性に関する理論化学的研究
（広島大院理、広島大 QuLiS）○吉川太基・赤瀬大・相田美砂子
- 11:50 昼食 （情報化学部会総会：15 分程度）

[2] ケモインフォマティクスのグローバル化：世界とコラボしよう！

（座長 金谷重彦）

- 13:00 KL* キーノートレクチャー Comprehensive Understand of Relationship Among Species, Volatile Organic Compound, and Biological Activity
（Universiti Malaysia Perlis、奈良先端大情）○Azian Azamimi Abdullah

[3] ポスターセッション

（座長 金子弘昌）

- 13:30 ポスターセッション
ショートプレゼンテーション（2分/1件）

14:10
~15:15

- P1 拡張された電子的記述子による生物学的等価体の分類に関する検討
(熊本大院自然科学) ○小杉侑誠・岩根陵・(熊本大院自然科学、東大先端研) 杉本学
- P2 電子状態インフォマティクスによる海洋生物由来カロテノイドの分類とその生物学的分類との対応に関する検討
(熊本大院自然科学) ○山之内昭博・岩根陵・(熊本大院自然科学、東大先端研) 杉本学
- P3 タンパク質の結合ポケットの類似性に関する検討：FMO 計算に基づく電子状態インフォマティクス解析
(熊本大工) ○井上貴文・(熊本大工、熊本大院自然科学、東大先端研) 杉本学
- P4 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
(熊本大工) ○田上晏莉・(熊本大工、熊本大院自然科学、東大先端研) 杉本学
- P5 生体アミン受容体を標的とするアゴニスト・アンタゴニストの分類と予測に関する電子状態インフォマティクス研究：電子的記述子拡張に関する検討
(熊本大工) ○森川郁美・(熊本大院自然科学) 太田広人・(熊本大工、熊本大院自然科学、東大先端研) 杉本学
- P6 **Statistical Electronic-Structure Informatics on Graphene Oxide**
(熊本大工) ○Chi Feng・(熊本大工、熊本大院自然科学、東大先端研) 杉本学
- P7 発火点決定ルールにおける決定木を用いた重要な記述子抽出の試み
(金沢工大工) ○林亮子・(金沢工大工、清水建設) 中田侑江
- P8 罰則付き回帰法に基づくタンパク質原子電荷の計算と性質
(東大生研) ○平野 敏行・佐藤 文俊
- P9 分子軌道計算によるスペクトルの精度の検討
(阪大薬) ○諏訪志典・(阪大院薬) 川嶋裕介・(阪大院薬、阪大微生物病研) 川下理日人・(阪大院薬) 藤居由基・(阪大院情) 田雨時・(阪大院薬) 藤岡弘道・有澤光弘・(阪大院薬、阪大微生物病研) 高木達也
- P10 演算子変換に基づく効率的な時間発展法の開発
(北大院理) ○赤間知子・(上智大理工) 小林理・南部伸孝・(北大院理) 武次徹也
- P11 粗視化ポテンシャルを用いたタンパク質四次構造の高速安定性評価
(豊橋技科大院工) ○柄本涼介・榎本大義・後藤仁志
- P12 量子化学計算と群知能を用いたアミン-CO₂系反応に対する反応シミュレータの開発
(早大先進理工) ○長門澄香・寺西慶・(早大理工研) 清野淳司・(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB) 中井浩巳
- P13 変数領域選択と適用範囲を考慮した土壌成分値予測のための非線形モデル開発
(東大院工) ○巖路・マテウス デ ソウザ エスコバル・金子弘昌・船津公人

- P14 3D フラグメント構造検索を用いた初期構造自動作成プログラムの構築
(産総研) ○和泉博
- P15 局所説明変数を用いたスパースモデリングによる異性体エネルギーの推定
(北大理、北大院理、JST さきがけ、京大 ESICB) ○小野田遼・小林正人・武次徹也
- P16 化合物の光分解性予測モデルの構築に関する基礎的検討
(阪大院薬) ○松山裕美・(阪大院薬、阪大微生物病研) 川下理日人・(阪大院情) 田雨時・(北陸大薬) 岡本晃典・(阪大院薬、阪大微生物病研) 高木達也
- P17 携帯情報端末を活用した分子情報可視化アプリケーションの開発
(豊橋技科大院工) ○佐伯敬志・鈴木貴洋・後藤仁志
- P18 薬用植物の化学生態学的応答を用いたトウキの機能性強化に関する研究
(奈良先端大情) ○森田侑介・金谷重彦・(立命館大薬) 田中謙
- P19 三次元構造類似性による二次代謝物の機能推定法の研究開発
(奈良先端大情) ○若松信孝・(長浜バイオ大) 白井剛・(奈良先端大情) 金谷重彦
- P20 ユーグレナのワックスエステル合成を最適化するためのネットワークモデルの構築
(奈良先端大情) ○横山直己・小野直亮・(国立遺伝子研) 有田正規・(大阪府大生命) 太田大策・(奈良先端大情) 金谷重彦

[4] 化学構造のケモインフォマティクスのセッション

(座長 金谷重彦)

- 15:15 O7* 縮約グラフを利用した化学グラフ生成に関する研究
(東大院工) ○宮尾知幸・金子弘昌・船津公人
- 15:40 O8* オープンアクセス NMR データベース、天然有機化合物 “CH-NMR-NP”
(NMRDBTech) ○早水紀久子・矢部篤子・(日本電子) 朝倉克夫・(JEOL RESONANCE) 栗本智充

(座長 長谷川清)

- 16:05 O9 Django と RDKit database cartridge を用いた化学構造データベースシステムの開発
(北里大薬) 上岡千紋・由井芹菜・山本栞・山崎広之・○西端芳彦
- 16:20 O10 fragment-based drug design のための候補フラグメントの組み合わせを選択する手法の開発
(北里大薬) ○山崎広之・西端芳彦・山乙教之・広野修一
- 16:35 O11 有機反応におけるデジタル化分子構造の回帰分析
(理研 CSRS) ○山口滋・袖岡幹子

16:50 休憩

[5] 特別講演：触媒化学のケモインフォマティクス

(座長 船津公人)

- 17:00 PL 特別講演 触媒インフォマティクスー固体触媒研究者の望み
(神奈川大工) ○上田渉

18:30 懇親会

9月30日(金)

[6] バイオインフォマティクスとケモインフォマティクスをつなぐセッション

(座長 中山伸一)

- 10:25 O12 ユーグレナのワックスエステル合成を最適化するためのメタボロミクス研究
(奈良先端大情、国立遺伝研) ○中本雅俊・(国立遺伝研) 有田正規・(大阪府立大) 太田大策・(奈良先端大情) 金谷重彦
- 10:40 O13 環構造に焦点をあてた生物二次代謝物のパスウェイ・マップへの分類
(奈良先端大情) ○江口遼平・金谷重彦・森田晶
- 10:55 O14* 薬膳料理の機能性評価に向けたDB構築
(奈良先端大情) ○金谷重彦・森田晶・大橋美名子・小野直亮・黄銘
- (座長 高島哲彦)
- 11:20 O15* 三大疾患に焦点をあてた革新的栄養学のための「食+ヘルスケア」DBの構築
(奈良先端大情) ○佐藤哲大・平井(森田)晶・大橋美名子・小野直亮・黄銘・金谷重彦
- 11:45 O16* 高分解能マスマスペクトルの情報化学
(奈良先端大情) ○西岡孝明・金谷重彦

12:10 昼食

[7] 若手セッション：若手の考える斬新な研究セッション(依頼講演)

13:10 若手セッション

(座長 金子弘昌)

- Y1 化合物・タンパク質・フェノタイプの多階層モデルによる標的タンパク質予測
(先端医療振興財団) ○岩田浩明・(京大院医) 奥野恭史
- Y2 タンパク質-リガンド結合における水分子の熱力学的効果とドッキング計算への応用
(神戸大院システム情報) ○上原彰太・田中成典
- Y3 薬物相互作用問題に対する計算化学的アプローチ - “薬物による代謝酵素誘導”問題への適用-
(富山化学工業) ○半田耕一・(北里大薬) 広野修一

(座長 山崎広之)

- Y4 分子記述子計算ソフトウェア mordred の開発
(阪大院薬) ○森脇寛智・(阪大院薬、阪大微生物病研) 川下理日人・(阪大院情) 田雨時・(阪大院薬、阪大微生物病研) 高木達也
- Y5 フェニアラニン水酸化酵素変異体の活性低下と阻害剤のシャペロン効果に関する *in silico* 要因解析
(北里大薬) ○早川大地・山乙教之・中込泉・小澤新一郎・吉田智喜・広野修一
- Y6 電極表面反応の分子レベルでの解析
(信州大環エネ研) ○内田太郎・(北大触媒研) 大澤雅俊

15:10 休憩

[8] 産業とケモインフォマティクスをつなぐセッション

(座長 金谷重彦)

- 15:30 O17* Generative Topographic Mapping Visualization Performance allied to Root Mean Square Error of Midpoints among Nearest Neighbors
(東大院工) ○Matt Escobar・金子弘昌・船津公人
- 15:55 O18 量子化学計算と機械学習を用いた金属クラスター触媒の活性因子の検討
(北大院理、JST さきがけ、京大 ESICB) ○小林正人・(北大院理、京大 ESICB) 岩佐豪・高敏・(北大院総化) 高木牧人・(北大院理、京大 ESICB、JST-CREST) 前田理・(北大院理、京大 ESICB) 武次徹也
- 16:10 O19 赤外スペクトルとケモメトリクス手法による法科学的血液試料の識別法の開発
(科学警察研) ○高村彩里・渡邊賢・(京都府立医科大) 池谷博・(科学警察研) 阿久津智子
- 16:25 O20* アンサンブル学習を活用した産業プラントにおける異常検出および異常状態推定
(東大院工) ○金子弘昌・船津公人
- 17:00 ポスター、口頭発表各賞受賞式&閉会