

第 40 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

会期：2017 年 10 月 26 日（木）～ 27 日（金）

会場：常盤工業会館（山口県宇部市東梶返 1 丁目 10-8、山口大学工学部正門向かい）

予稿原稿締切：9 月 15 日（金）

事前参加登録締切：9 月 22 日（金）

予稿集公開：9 月 29 日（金）

討論会ホームページ：<http://cicsj.chemistry.or.jp/sympo/40/>

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 分です。

10 月 26 日（木）

（座長 林亮子）

10:30 O1* 大規模化合物データベースの類似度検索技術

（理研）田部井靖生

10:55 O2 糖鎖科学ポータル基盤となる糖鎖表記法の開発とデータベース連携

（野口研究所）山田一作・（創価大学）木下聖子

（座長 田部井靖生）

11:10 O3* fragment-based drug design の候補フラグメントの組み合わせを選択するための代表化合物ライブラリの開発

（北里大薬）山崎広之・西端芳彦・市村博信・山乙教之・広野修一

11:35 O4 決定木とランダムフォレストを用いた発火点予測および発火点決定ルール抽出

（金沢工大工）林亮子

11:50 昼食休憩（情報化学部会総会：15 分程度）

(座長 隅本倫徳)

13:00 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)

13:40 – 15:10 ポスター発表

- P1 ハロゲン置換オレフィンの π -結合強度と(E)/(Z)エネルギー差に関する
計算化学的考察
(産総研) 内丸忠文・都築誠二・陳亮・水門潤治
- P2 環構造対応 3D フラグメント構造検索初期構造自動作成プログラムの構
築
(産総研) 和泉博
- P3 ニュートラルロス・フラグメントペアを用いたフラグメンテーション予
測
(ヒューマン・メタボローム・テクノロジーズ) 山本博之・(理研) 津川
裕司
- P4 化学構造の局所類似性を表す新規指標とそのネットワーク理論的解析へ
の応用
(理研) 松岡聖二・吉田稔
- P5 特許公開公報に出現する化学物質名の分析
(筑波大院図情メディア) 田中るみ子・(筑波大院図情メディア) 中山伸一
- P6 データ駆動型アプローチに基づく ELNES スペクトルの再現及び解釈
(東大生産研) 清原慎・溝口照康
- P7 MD による蛋白質リガンド相互作用とランダム行列理論による解析
(日大理工) 山中雅則
- P8 FMO 法によるフラグメント結合エネルギーを用いた CDK2 阻害剤の
3D-QSAR
(北里大薬) 吉田智喜・山乙教之・広野修一
- P9 分子動力学計算を用いたアルドケト還元酵素 AKR1C3 の C154Y 変異体
の溶液構造解析
(昭和大薬) 渡邊友里江・早川大地・(岐阜薬科大) 遠藤智史・(昭和大薬)
合田浩明
- P10 トリメチルアミン-/N/-オキシドと溶媒分子間の特異的相互作用に関す
る理論化学的研究

- (広島大院理・広島大 QuLiS) 蔵本裕哉・赤瀬大・相田美砂子
- P11 3次元格子点を用いた重ね合わせが不要で配座変化に頑健なタンパク質特性記述子の創成
(北里大院薬) 川崎惇史
- P12 植物由来の分子の分類と香りの相関に関する電子状態インフォマティクス研究
(熊本大工) 空閑瞳・杉本学
- P13 三次元的電子状態トポロジーの形状類似性評価手法の開発
(熊本大工) 井上貴文・杉本学
- P14 電子状態インフォマティクスによる Fatty Acid Synthase (FAS) 阻害剤の構造活性相関に関する研究
(熊本大工) 井手尾俊宏・杉本学
- P15 電子的アナロジーに基づく有機分子の分類：電子状態インフォマティクスの応用
(熊本大工) 山之内昭博・杉本学
- P16 知識情報統合型電子状態データベースの開発
(熊本大工) 小杉侑誠・杉本学
- P17 昆虫の摂食行動を制御する生体アミン受容体に関する電子状態インフォマティクス研究
(熊本大工) 森川郁美・杉本学

(座長 杉本学)

- 15:20 O5 超臨界 CO₂ に溶解した p-nitroaniline のソルバトクロミズムに関する理論的研究：フラグメント化の手法を基とした分子理論によるアプローチ
(お茶大院人間文化創成科学) 寺島千絵子・黒木菜保子・(お茶大基幹研究院・JST さきがけ) 森寛敏
- 15:35 O6 イオン液体中の CO₂ 吸収特性の迅速予測を目指した量子化学と情報科学の融合
(お茶大院人間文化創成科学・JST ACT-I) 黒木菜保子・(お茶大基幹研究院・JST さきがけ) 森寛敏
- 15:50 O7 フェルラ酸の抗酸化作用に関する理論的研究
(城西大理) 寺前裕之・(城西大薬) 加藤洋介・高山淳・坂本武史
- 16:05 O8 理論計算と反応速度論シミュレーションを用いた薬剤の加水分解安定性

評価

(TS テクノロジー)山口、徹眞田昭平, (山口大院創科)隅本倫徳, 堀憲次

(座長 中山伸一)

16:30 PL 特別講演
寺倉清之氏 (物質・材料研究機構、エグゼクティブアドバイザー、名誉フェロー)
マテリアルズ・インフォマティクスの現状と課題

18:30 懇親会 (国際ホテル宇部)

10月27日 (金)

(座長 森寛敏)

10:30 O9 フタロシアニン類-フラレーン系における電子状態の量子化学計算と考察
(宇部高専) 成島和男・池永祐乙・光井和輝

10:45 O10* 溶媒が NMR 遮蔽定数に及ぼす影響についての理論化学的研究
(広島大院理・広島大 QuLiS) 今井拓也・赤瀬大・相田美砂子

11:10 O11 塩化シアヌルを用いたベックマン転位の理論的研究
(山口大院創成科学) 山田和・隅本倫徳・堀憲次

11:25 O12 遷移状態データベースを援用した多反応の短時間可能性評価
(山口大院創成科学) 堀憲次

11:40 昼食休憩

(座長 高橋崇宏)

13:00 O13 構造式からの Ames 変異原性予測
(岐阜大地域科学) 澤田敏彦・橋本智裕・和佐田裕昭・(岐阜大名誉教授)
利部伸三

13:15 O14* 深層学習による溶解度予測とその化学的考察
(東大院工) 鈴木天音・田中健一・船津公人

13:40 O15* QSPR study on prediction of the liquid crystalline behavior using ensemble
methods and structural fragments

(東大院工) 陳嘉修・田中健一・船津公人

(座長 荒川正幹)

- 14:05 O16 化学物質の藻類に対する毒性予測
(阪大薬) 吉田愛珠・(阪大院薬) 森脇寛智・田雨時・高木達也
- 14:20 O17 化学気相堆積法のための自動実験計画システムの開発と評価
(静岡大工) 高橋崇宏・倉陸人
- 14:35 O18* プロセス運転情報を活用した適応型モデル選択法の開発
(東大院工) 弓削伸宏・田中健一・船津公人
- 15:00 閉会式、ポスター・口頭発表各賞授賞式