

第5回 発動分子科学サロン「発動分子とAI」

日時 2023年2月2日(木) 13時30分から

場所:東京工業大学すずかけ台キャンパス S8 レクチャーホール(ハイブリット聴講可能)

(<https://www.titech.ac.jp/0/maps/suzukakedai>)

13:30—13:35 開会挨拶

13:35—14:20 大上 雅史 先生(東工大)

講演タイトル:AIによる創薬支援の最前線

概要:AlphaFold に代表される AI 技術が創薬分野にも積極的に活用されている。本講演では、我々が取り組んでいるタンパク質間相互作用の予測や阻害剤設計のための手法開発の事例を中心に、AIによる創薬支援計算の最新動向について紹介する。

14:20—15:05 畠山 敏 先生(早稲田大)

講演タイトル:実験化学者による有機材料研究のためのデータ科学ツールの開発

概要:有機材料研究を効率的に推進するためのデータ科学ツールを、実験研究者の立場で開発している。解析に適した電子実験ノート、物性予測・構造提案システムについて、その学理や運用状況を紹介します。

15:05—15:20 休憩

15:20—16:05 榎山 儀恵 先生(分子研)

講演タイトル:有機合成のデジタル化

有機合成と情報科学の異分野融合による学術変革領域「デジタル有機合成」が2021年9月に発足しました。本講演では、有機合成におけるAIの活用について、現状を踏まえながら、演者の挑戦を紹介します。

16:05—16:50 井上 圭一 先生(東大)

講演タイトル:AIによる高機能性タンパク質探索とデザイン

概要:私達のグループでは、これまでにアミノ酸配列情報をもとに、より高機能なタンパク質分子の探索やデザインを行うAIの開発と実験的な応用に取り組んできた。本研究会ではこれまでの事例と今後の展望について紹介する。

16:50—16:55 閉会挨拶