

—NAIST データ駆動型サイエンス創造センターキックオフシンポジウム開催のお知らせ—

奈良先端科学技術大学院大学（NAIST）は、科学技術のパラダイムの変化に対応し、データ駆動によって新しい研究領域を開拓する「データ駆動型サイエンス創造センター」を学内に設置しました。この創設を機に「NAIST データ駆動型サイエンス創造センターキックオフシンポジウム」を以下のとおり開催します。

本シンポジウムでは、本学のデータ駆動型サイエンス創造センターのねらいと各部門からの研究内容の紹介をいたします。加えて、ケモインフォマティクス分野の世界トップクラスの研究者を海外から招き、研究のフロンティアについて解説します。

ご関係の皆様をお誘いの上、多数のご参加をいただけますようお願い申し上げます。

- 日 時： 2017年11月14日（火）9：30～16：30
- 会 場： 奈良先端科学技術大学院大学 ミレニアムホール
〒630-0192 奈良県生駒市高山町 8916 番地の 5
（アクセスマップ：<http://www.naist.jp/accessmap/>）
- 参加費： 無料（事前登録不要）
- 主 催： 奈良先端科学技術大学院大学
- 後 援： 公益社団法人 関西経済連合会
公益財団法人 関西文化学術研究都市推進機構
公益財団法人 奈良先端科学技術大学院大学支援財団

■プログラム（予定） 【同時通訳付き】

- 9:30 開会挨拶： 横矢直和 （奈良先端科学技術大学院大学（奈良先端大）学長）
- 9:35 来賓挨拶： 長尾 真 様 （国際高等研究所 所長）
中川雅永 様 （関西文化学術研究都市推進機構 常務理事）
- 9:45 データ駆動型サイエンス創造センター紹介：
中村 哲（奈良先端大 データ駆動型サイエンス創造センター(DSC) センター長）



Bio

工学博士。奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター長、情報科学研究科教授、理化学研究所革新知能統合研究センター（AIP）観光情報解析チームリーダー、ドイツカールスルーエ工科大学 Honorarprofessor、ATR フェロ

一、および IEEE フェロー。

Abstract

奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センターは2017年4月4日に創設されました。当センターでは、シミュレーション、データサイエンス、機械学習、人工知能などの技術を用いて物質情報学、ケモインフォマティクス、バイオインフォマティクス分野の新たな研究を目指します。

【講演】

10:00 船津公人（奈良先端大 DSC・研究ディレクター／東京大学 工学系研究科）
“Development of Data-driven Chemistry”



Bio

目的物性・特性を持つ新規分子・材料開発に相当する「何を作るか」から、それを「どう作るか」、そしてそれを安定した品質で生産するための生産プロセス監視と制御に関わる課題について、ケモインフォマティクス利用による、分子・薬物設計、材料設計（プロセス条件も含む）、構造解析、合成経路設計、化学プラントなどを対象とした監視と制御のためのソフトセンサー開発に取り組んでいる。2004年4月より東京大学工学系研究科教授。2004年～2014年日本化学会情報化学部会長、2011年ストラズブル大学招聘教授。2017年10月より東京大学とのクロスアポイントメントにより奈良先端大DSC・研究ディレクター。

Abstract

目的の物性・特性を持つ新しい分子構造、材料の研究開発、さらにはその生産プロセスの立案およびそのプロセスにおける製品品質維持のためのプロセス監視とその制御のために、第4の科学であるデータ集約型化学にこれまでにない強い期待が寄せられている。目的物性・特性を持つ新規分子・材料開発に相当する「何を作るか」から、それを「どう作るか」、そしてそれを安定した品質で生産するための生産プロセス監視と制御に関わる課題に迅速かつ効果的に対応するには、いまや多くのデータ・情報の積極的活用が不可欠となってきたとの時代の判断がそこにある。このような点に焦点を当ててデータ駆動型化学を展望する。

10:20 Prof.Dr. Johann Gasteiger (The University of Erlangen-Nürnberg)
“Chemoinformatics - Learning from Chemical Data”



Bio

Prof. Dr. Johann Gasteiger has studied chemistry and had positions at the University of Munich, Germany, ETH Zürich, Switzerland, University of California, Berkeley, USA and Technical University of Munich, Germany. In 1994 he moved to the University of Erlangen-Nürnberg, Germany where he co-founded the Computer-Chemie-Centrum. He is one of the initiators of Chemoinformatics in Germany and has produced more than 250 scientific publications in this field. His work was recognized by several international awards.

Abstract

Chemical knowledge heavily rests on data. It will be shown how data can be used to predict the 3D structure as well as spectra of novel organic compounds. Data can allow the determination of the origin of food samples, can be utilized in the design of the synthesis of novel organic compounds and in the engineering of biochemical pathways.

10:50~11:00 休憩

11:00 Prof.Dr. Thierry Langer (University of Vienna)
“In Silico Tools for Early Drug Discovery”



Bio

Professor Thierry Langer, head of the Department of Pharmaceutical Chemistry at Vienna University, is well known in the computational chemistry field for his contributions to pharmacophore-based modeling. He has published more than 180 original papers and reviews. In 2003, he co-founded Inte:Ligand GmbH, the company which develops the LigandScout molecular design software suite.

Abstract

In his talk, Prof Langer will highlight the use of modern computer-aided molecular design tools for optimizing the hit discovery, hit to lead expansion, and lead optimization phases in early drug discovery. Several examples will be given, ranging from in silico fragment design, to the use of molecular dynamics for determining favored ligand binding modes.

11:30 畑中美穂（奈良先端大 DSC・マテリアルズ・インフォマティクス部門（兼） 特任准教授）

“Automated Search for Chemical Reaction Pathways and Analysis by Machine Learning: A Case Study on Asymmetric Aldol Reaction”



Bio

慶應義塾大学にて博士(理学)を取得後、京都大学福井謙一記念研究センターフェロー、近畿大学理工学部助教を経て、2017年4月より研究推進機構（兼 物質創成科学研究科・データ駆動型サイエンス創造センター）特任准教授。マテリアルズ・インフォマティクス研究室を主催。計算化学の手法を用いて、触媒反応や発光材料の機構解明・分子設計を行っている。特にレア・アースを含む材料の理論解析を可能にする計算方法の開発に力を入れており、英国王立化学会の PCCP Prize を受賞するなど高い評価を受けている。2015年 JST さきがけ研究員採用を期に、計算化学の最新の手法の一つである自動反応経路探索法と機械学習を組み合わせた効率的解析に取り組んでいる。

Abstract

計算化学は、様々な化学反応や機能性材料の機構解析・分子設計の指針の構築に大きく貢献してきた。特に近年、自動的に化学反応の経路を探索する技術が発展し、計算化学により取得できる情報が飛躍的に多くなってきた。その中でも人工力誘起反応法は、反応に関わる化合物と、有機化学でお馴染みの「矢印」の情報があれば、反応経路上の中間体や遷移状態をほぼ自動的に、網羅的に調べ上げることを可能にした。しかし、新しい問題も生じた。それは、得られる化学構造が多過ぎるという問題である。これまで、得られた情報の解析はユーザーに委ねられていたが、我々は機械学習を用いた効率化を目指している。講演では触媒反応を例に、自動反応経路探索と機械学習の融合の例や今後の展開について議論する。

12:00～13:00 昼食休憩

13:00 Prof.Dr. Didier Rognan (University of Strasbourg)

“PDB-scale identification of druggable cavities at or nearby protein-protein interfaces.”



Bio

PharmD, PhD in Medicinal Chemistry

Head of the Laboratory for Therapeutic Innovation- Univ. Strasbourg, France

Research Director at National Centre for Scientific research (CNRS)

Co-founder of Biodol Therapeutics, a SME dedicated to the treatment of neuropathic pain

Main interests: Structure-based drug design and synthesis of bioactive compounds.

Abstract

Protein-protein interfaces (PPIs) represent an exciting but challenging opportunity to develop first-in class and selective drugs. To rationalize the discovery of PPI inhibitors, we have developed a unique flowchart is made of several steps utilizing in-house developed cheminformatics solutions to answer key issues in detecting reliable PPIs, identify druggable cavities at the interface or its close vicinity, and then screen compound libraries for compounds able to fit a cavity-based pharmacophore.

13:30 Prof.Dr. Jürgen Bajorath (the B-IT Institute of the University of Bonn)

“Big Data in Medicinal Chemistry and Chemoinformatics”



Bio

Jürgen Bajorath is Professor and Chair of Life Science Informatics at the University of Bonn and an Affiliate Professor at the University of Washington, Seattle. His research focuses on chemoinformatics and the development of computational methods for medicinal chemistry, chemical biology, and ‘big data’ analysis in the life sciences.

Abstract

The 'big data' concept plays an increasingly important role in many scientific fields. Different from the situation in physics and biology, big data in medicinal chemistry are just beginning to emerge but substantially challenge the discipline. Computational analysis highlights big data issues and presents novel insights into medicinal chemistry questions.

14:00 Prof.Dr. Alexandre Varnek (University of Strasbourg)

“Chemical reactions mining : Big Data challenge”



Bio

PhD in physical chemistry in 1985 from the Russian Academy of Sciences, Moscow. Since 1995, professor in theoretical chemistry at the University of Strasbourg, France. (Co)author of 1 monograph, 5 textbooks and more than 200 research articles and book chapters. Research interests: new methodologies for 2D and 3D virtual screening, chemical data analysis and visualization.

Abstract

This lecture concerns application of Condensed Graph of Reaction approach to reaction data curation, searching, visualization, analysis and structure-reactivity modeling. Particular attention is paid to models predicting kinetic and thermodynamic parameters as well as optimal experimental conditions (catalyst, solvent, additives, etc) of reactions.

14:30~14:50 休憩

14:50 Prof.Dr. Gisbert Schneider (ETH Zürich)

“Artificially-intelligent drug design”



Bio

Gisbert Schneider is a full professor at ETH Zürich (Chair for Computer-Assisted

Drug Design). Before joining ETH in 2010, he headed the cheminformatics group at Roche, and was a Professor at the Goethe-University in Frankfurt. He is an elected Fellow of the University of Tokyo, and the recipient of the 2018 Herman Skolnik Award of the American Chemical Society.

Abstract

This presentation presents the current state-of-the-art in automated drug design, focusing on contemporary machine-learning approaches and technologies that could be implemented robustly by medicinal chemists in the near future. We will critically analyze the opportunities and challenges for their more widespread application by presenting worked examples.

15:20 森 浩禎 (奈良先端大 DSC・バイオインフォマティクス部門 教授)

“Towards complete understanding of a cell”



Bio

データサイエンスセンター・教授 (バイオサイエンス研究科・教授 (兼任))。京都大学博士 (理学) 取得。滋賀医科大学医学部、熊本大学医学部、京都大学ウイルス研究所を経て、本学に着任。2009 年 American Society of Microbiology, Academy fellow。2010 年 Royal Society of Chemistry, Fellow。大腸菌を用いた分子生物学、ゲノム解析研究、バクテリアを用いたシステム生物学に従事。

Abstract

私たちは 1997 年に大腸菌ゲノムを完成させ、その後はこのモデル生物の完全理解に向けた網羅解析のための研究リソース構築を進めた。同時に網羅的計測技術の開発等も進め、Transcriptome や Proteome、Metabolome など、OMICS 研究を牽引してきた。

これらのデータが示してきた事は、如何に細胞内での遺伝子間相互作用ネットワークが重要であるかという点である。

現在、私たちは細胞内遺伝子間相互作用の理解に向け、これまで構築した欠失株と接合現象を利用し、欠失の二重化を行う事で、遺伝子間機能相互作用ネットワークに解明に取り組んでいる。大腸菌は約 4000 のタンパク質をコードする遺伝子を持つ。全ての組合せによる二重化は 1600 万組合せにもなる。これまでの系統的な細胞活動の計測データおよび細胞内遺伝子相互作用解析結果から、大腸菌というモデ

ル生物の完全理解に向けた取組みを紹介する。

15:50 金谷重彦（奈良先端大 DSC・データサイエンス部門（兼） 教授）

“Data-intensive science toward ecosystem and healthcare”



Bio

情報科学研究科・計算システムズ生物学研究室にて、2008年より、メタボロームデータ、特に、二次代謝物とそれを生産あるいは保持する生物種の間を科学文献より収集したデータベース KNApSAcK の構築を進めている。本 DB は (http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK_Family/) より無償公開し、世界のメタボローム研究者に活用され、Plant Physiology などの論文賞を取るなど世界でも高く評価されている。

Abstract

ゲノム情報解析を目的としたバイオインフォマティクスは、現在、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボロームを含む生体分子をもととしたシステムバイオロジーへと展開されている。特に、メタボローム研究においては、ケモインフォマティクスを活用とした研究が、バイオインフォマティクスの中にも必要となっている。本講演では、データ駆動型サイエンスの一環として、ヘルスケア、エコロジーに焦点をあてビッグデータバイオロジーとしてバイオインフォマティクスとケモインフォマティクスの活用例を、計算システムズ生物学研究室の研究例と中心に紹介し、データ駆動型サイエンスの展開を検討したい。

16:20 閉会挨拶：中村 哲（奈良先端大 DSC・センター長）

16:30 終了

■連絡先： 奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター

Email : dsc-info@dsc.naist.jp Tel : 0743-72-6056

HP : http://www-dsc.naist.jp/dsc_jp/