

JBIC 主催 プレゼンテーションのご案内

時 間	10月10日(水) 13:00 - 14:30
場 所	パシフィコ横浜 展示会場内 メインステージ (JBIC ブース C-52 の後方です)

10日(水) 13:00 - 13:30

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター
3D分子設計チーム 研究チーム長 **福西 快文**

データベースと機械学習での創薬応用：中分子に向けて

機器・ロボットの進化、細胞や実験プロトコルの標準化などによって化合物の蛋白質結活性や物性値など、遺伝子配列以外のデータも量産されるようになった。実験データの整理や知識の発見は、基礎方程式の発見が根本的である。しかし現象論的な方程式の構築さえ情熱を要するために、結果のみ求める現代では理論までは作れない場合が多く、適当なメカニズムとデータの連続性・微分可能性のみを仮定して機械学習による回帰分析を使う場合が多い。機械学習は、真理の追究を捨てた半面、データの入手できる範囲ならば、複雑な問題や定義も明確でない問題でさえ実用的な時間である程度の答えを与えることができる。ここでは、低分子から中分子への創薬の広がりにおいて、理論計算の困難さから機械学習が要求される場面が多いと予想されるので、薬物の蛋白質結活性や物性などについて、機械学習での応用事例、近似モデルの設定、問題点などを紹介する。

10日(水) 13:30 - 14:00

東京医科歯科大学 名誉教授・特任教授 医療データ科学推進室 室長 兼
東北大学 特任教授 東北メディカル・メガバンク機構 機構長特別補佐 **田中 博**

バイオ分野データサイエンス関連人材育成

次世代シーケンスの発展や、ウェアラブルセンサーによるモバイルヘルスの進展により、医療もビッグデータ時代を迎えた。ビッグデータ時代を迎えて医療もデータ駆動的な科学として、大きくパラダイム変革を迎えつつある。これまで主張されてきた個別化医療、先制医療、生涯医療などはビッグデータの発達とともに可能になりつつある。今後の課題は、このように膨大化したデータをいかに解析して医療・医学の発展に役立つかである。本講演では、この点に関して、近年大変革を遂げて、急速に発展した人工知能、具体的には deep learning (深層学習) がどのように医療・創薬の姿を変革しつつあるか、すなわち AI 医療、AI 創薬の研究の現状について講演する。また、今後必要とされる、ビッグデータ解析や人工知能応用などの新しいデータサイエンスの人材育成についても触れる。

10日(水) 14:00 - 14:30

東京医科歯科大学 難治疾患研究所 ゲノム病理学分野 教授 兼
東京大学 大学院医学系研究科 分子予防医学分野 教授 **石川 俊平**

人工知能によるゲノム病理情報の利活用

ディープラーニングの技術進展により一般画像の解析だけでなく、病理画像をはじめとする医療画像にも人工知能の適用が広まりつつある。病理画像は画像のデータサイズ、多様な拡大率における異なる情報、アラインメントの不均一性などといった点で一般画像と異なりそれに応じた学習法が必要とされる。その医療における使い方に際しても、ディープラーニング等人工知能の持つ特性を十分に理解した活用法が求められる。演者らが参加した画像解析国際コンペの報告を交えて、病理画像解析の実際と世界的な競合状況について話す予定である。また病理画像の特徴を捉えた類似画像を検索するシステム (CBIR: Contents Based Image Retrieval) の開発とツールとしての実装についての解説を行ない、さらにこれを発展させてがん病理画像からゲノム異常を推定する手法についても触れる予定である。