

TS01

日時： 2025 年 10 月 27 日 13:00-17:00

場所： 4 F 研修室

Pythonを使ったケモインフォマティクス チュートリアル Cheminformatics tutorial with python

セミナー概要：

1) 最新バージョンのRDKitの紹介：Greg Landrum氏

RDKit 開発者のGreg Landrum氏をお招きし最新バージョンのRDKitに実装された機能を紹介していただきます。

コードの共有が可能であれば参加者の皆様もその場で一緒にコーディングしていただくことができます。

2) ハンズオントレーニング

化合物情報の前処理～特徴量算出～データスプリットなどのプロセスはケモインフォマティクスのタスクにおいて非常に大切な部分です。今回のチュートリアルではデータの前処理、特徴量算出、データスプリットなどに有用なパッケージを題材としてハンズオントレーニングを行います。

また、処理したデータを用いて、構造生成、またはGNN予測モデルの作成などについても実施してみる予定です。

参加者皆様の日々のインフォマティクスの業務でも利用できる情報を持ち帰っていただくことをゴールといたします。

必要なスキル

- ・ Conda などを利用した環境構築が自身でできる方
- ・ ケモインフォマティクス関連のプログラムを書いた経験がある方。
- ・ 環境構築に不安を感じる方は参加をお控えください。コードは公開予定です

モデレーター： 芹沢 貴之（第一三共株式会社）、大川 和史（塩野義製薬株式会社）、
新井 浩一郎（旭化成ファーマ株式会社）、高橋 一敏（味の素株式会社）、
宮野 奈津美（帝人ファーマ株式会社）

-
- ・ 参加費： 33,000円(税込)
 - ・ 申込〆切： 9月26日
 - ・ 定員： 84名
-