

化学関連研究支援システムの理解、確認、適用 Understanding and confirmation of the research support systems

化学関連研究支援システムの適用や利用は殆ど総ての化学分野で実施され、研究者にとり必需品となっている。研究支援システムの選択、適用、理解が不十分であれば研究そのものの信頼性欠如、研究の失敗、時間や費用の無駄とその影響は破壊的となる。また、化学研究支援システムは常に単体で稼働するものではなく、データの収集や関連システムとの連携等にも考慮が必要であり、この場合の連携性も大事となる。また、より大きい観点では、会社のデータ管理システムとの連携等も必要で、これらを考慮しなければシステムの管理すら出来なくなる。

研究支援システムは単に機能的な観点のみならず、様々な観点からの考慮が大切である。また、自分の研究に必要な機能の最適化（システム利用、委託開発、コンサルタント、自主開発、他）を目指しての戦略から戦術への慎重な検討が必要である。

以下に現時点で取りうる研究支援システムの検討についての可能性を列挙する。

1. 既存の研究支援システムの概要、適用、他
2. 研究目的内容を実現するシステムを委託開発して構築する
3. 研究支援システムと支援システムの適用コンサルを受ける
4. ITに興味があり、特に自分の研究でのカスタマイズ等自分で試みる
5. 複数の支援システムを用いて、従来にはなかった独自の研究目的を実施する
6. 化学研究支援システム適用上での重要な留意事項

研究支援システムは、職人の道具と同じである。自分の研究に最適なシステムを使ってこそ実りある研究成果を享受できる。さもなければ、間違った結果、現場での混乱、社内システムとの非連携性、システムの更新やシステム間連携等も出来なくなる。研究の大事な道具である、研究支援システムは、職人の道具以上に慎重に決めることが重要である。

今回は、研究支援システムの選択、構築、コンサル適用、システム関連アプリ、システム連携や、研究支援システムとして留意すべき様々な点に関する討論をチュートリアル形式で行う。

モデレーター： 湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)
株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

13:00～13:10

◇開会の挨拶と開催趣旨（研究支援システムの様々な選択、開発、適用、利用形態）説明

湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)
株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

13:10～13:50

1. 演題：「CLARITY および CLARITY PV によるトランスレーショナル・セーフティ・リサーチ」

演者：東田 欣也 (Kinya Toda)
株式会社モルシス (MOLSIS Inc.)

13:50～14:30

2. 演題：「富士通が行う、AI 創薬のための研究支援」

演者：古賀 裕美 (Hiromi Koga)
富士通 (Fujitsu, Ltd.)

14:30～14:40

◆休憩 (10分)

14:40～15:20

3. 演題：「AI 創薬プラットフォーム Elix Discovery™の活用事例及び AI 創薬最新動向」

演者：結城 伸哉 (Shinya Yuki)
株式会社 Elix (Elix, Inc.)

15:20～16:00

4. 演題：未定

演者：未定

NVIDIA (Nvidia Corporation)

16:00～16:30

5. 演題：「データサイエンスと人工知能を併用した「マルチターゲット創薬」の実施」

湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)

株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

16:30～17:00

6. 演題：「研究支援システム適用上での重要な留意事項」と閉会の挨拶

湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)

株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)