

ケモインフォマティクス秋の学校

Autumn School of Chemoinformatics in Tokyo

主催: 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻船津研究室

<http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp>

共催: 京都大学大学院薬学研究科奥野研究室

<http://pharminfo.pharm.kyoto-u.ac.jp/>

協賛: 日本化学会情報化学部会

<http://cicsj.chemistry.or.jp/index.html>

日時: 2011年11月15, 16日

場所: 東京大学山上会館2階大会議室(東京都文京区本郷7-3-1)

http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01_00_02_j.html

アクセス: http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/map01_02_j.html

ケモインフォマティクス分野で世界的に著名な先生方が一堂に会してシンポジウムです。創薬などを中心に各先生の新しい視点での取り組みについてのチュートリアル、そしてソフトウェア・ベンダーによる最新のソフトウェア・エキスパートの二本立てで構成しています。ケモインフォマティクスの新しい手法の創薬、材料設計への大いなる可能性を感じて頂きたいと思います。

11月15日

Opening remarks: Prof. Kimito Funatsu (The University of Tokyo)

[Tutorial session]

10:00~11:00 Prof. Juergen Bajorath (Bonn University)

“Extracting SAR Information From Activity Landscape Representations”

11:00~12:00 Prof. Yasushi Okuno (Kyoto University)

“Integration of Chemoinformatics and Bioinformatics for Drug Discovery”

12:00~13:30 Lunch

13:30~14:30 Prof. Gisbert Schneider (ETH Zurich)

“From Fragments to Drugs: Designing the Molecular World”

14:30~15:30 Dr. Anthony Nicholls (OpenEye Scientific Software)

“Robust QSAR”

15:30~16:00 ----- Break -----

[Expert session by Software Vendors]

16:00~16:30 Dr. Robert Fraczekiewicz (Simulation Plus)

“Estimated Quantum Descriptors, Artificial Neural Networks, and Genetic

- Algorithm Based Feature Selection in Predicting Metabolism and Toxicity”
- 16:30~17:00 Dr. Marcus Gastreich (BioSolveIt)
“Novel Binding Affinity Estimates in Drug Discovery With a Focus on Lead Optimization”
- 11 月 16 日
[Tutorial session]
- 10:00~11:00 Dr. Kiyoshi Hasegawa (Chugai Pharm.)
“Advanced PLS Techniques in Chemoinformatics Studies”
- 11:00~12:00 Prof. Johann Gasteiger (Erlangen-Nuernberg University, Molecular Network)
“Prediction of Toxicity and Metabolism of Chemicals”
- 12:00~13:30 Lunch
- 13:30~14:30 Prof. Kurt Varmuza (Technical University of Vienna)
“Evaluation of Empirical Chemometric Models for Calibration and Classification”
- 14:30~15:30 Prof. Alexandre Varnek (Strasbourg University)
“Chemical Space: Design, Visualization and Navigation”
- 15:30~16:00 ----- Break -----
- [Expert session by Software Vendors]
- 16:00~16:30 Dr. Robert Brown (Accerlys)
“Quantifying Model Errors Using Similarity to Training Data”
- 16:30~17:00 Dr. Murco Ringnalda (Schrodinger)
“Roadmap of Schrodinger's Chemoinformatics Solutions”

Closing remarks: Prof. Yasushi Okuno (Kyoto university)

参加費： 一般参加者 3,000 円 (学生:1,000 円) 当日会場受付でお支払い下さい。

参加登録： 会場の座席数に限りがありますので参加ご希望の方は、**10 月 31 日までに**以下のメールアドレスまでご連絡下さい。その際に、件名に『ケモインフォマティクス秋の学校参加申込み』とお書き頂き、氏名、所属、メールと電話番号を明記して下さい。定員になり次第申込みを締め切らせて頂きます。

参加申込み連絡先： 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻船津研究室

e-mail: mokamura@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

URL: http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/autumn_school.htm

問合せ先： 東京大学大学院工学系研究科 船津公人教授

e-mail: funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

TEL: 03-5841-7751