

## ケモインフォマティクス秋の学校

### Autumn School of Chemoinformatics in Nara

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: 日本化学会情報化学部会

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

協賛: 日本薬学会

日時: 2013年11月27~28日

場所: 奈良県立公会堂能楽堂

アクセス: <http://www.shinkokaido.jp/welcome/>

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同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。

【実行委員会】船津 公人(東京大学)、奥野 恭史(京都大学)、金谷 重彦(奈良先端科学技術大学院大学)、長谷川 清(中外製薬)

11月27日

開会挨拶: Prof. Kimito Funatsu (The University of Tokyo)

[Tutorial session]

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

“Chemoinformatics at the Interface with Chemical Biology – Concepts and applications”

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

"Systems Chemical Biology: Unifying Chemoinformatics and Bioinformatics"

12:00~13:30 Lunch

13:30~14:30 Dr. Kiyoshi Hasegawa(Chugai-Pharmaceutical Co.)

“Bayesian statistics for drug design”

14:30~15:30 Prof. Johann Gasteiger (Erlangen-Nuernberg University)

“Solved and unsolved problems in chemoinformatics”

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

[Expert session by Software Vendors]

16:00~16:30 Certara

Dr. Brian Masek (Certara USA)

“Progress in Predicting Off Target and Safety Profiles”

- 16:30~17:00    OpenEye  
                  Dr. Krisztina Boda (OpenEye Scientific Software, Inc.)  
                  “OEToolkits: The Building Blocks for Software Innovation”
- 17:00~17:30    BioSolveIT  
                  Dr. Marcus Gastreich (BioSolveIT GmbH)  
                  “Filling a Gap in Computational Lead Optimization:  
                  Proposing Fragments and Visualizing their “Happiness” in Binding Pockets”
- 17:30~18:00    Schroedinger  
                  Dr. Osamu Ichihara (Schroedinger)  
                  “Free energy calculations and rapid empirical scoring functions; insight into  
                  structure based drug design”
- 18:20-19:00    奈良国立博物館国宝館見学
- 19:00-21:00    懇親会： 奈良国立博物館地下レストラン  
                  URL: [http://www.narahaku.go.jp/english/index\\_e.html](http://www.narahaku.go.jp/english/index_e.html)

11 月 28 日

[Tutorial session]

- 9:00~10:00    Prof. Didier Rognan (Strasbourg Univ.)  
                  " Computational methods to profile bioactive ligands"
- 10:00~11:00    Prof. Gisbert Schneider (ETH Zurich)  
                  "From chaos to order by adaptive molecular design"
- 11:00~11:15    ----- Break -----
- 11:15~12:15    Prof. Takaaki Nishioka (Nara Institute of Science and Technology)  
                  "Mass spectral database MassBank and its application to chemical structure  
                  elucidation"
- 12:15~13:30    Lunch
- 13:30~14:30    Prof. Kurt Varmuza (Technical University of Vienna)  
                  "Variable selection for multivariate models - myth and reality"
- 14:30~15:30    Prof. Alexandre Varnek (Strasbourg University)  
                  "Chemography concept in Chemical Space analysis"
- 15:30~16:00    ----- Break -----

[Expert session by Software Vendors]

- 16:00~16:30    PerkinElmer-Spotfire  
                  Dr. Toshio Maruo (PerkinElmer Japan)  
                  "Accelerating Research Process by Visual Analytics"

16:30~17:00 Accerlys

Dr. Yuji Takaoka (Accerlys Japan)

“Chemoinformatics tools in Accerlys Enterprise Platform”

17:00-17:30 化学情報協会・英国 CCDC

Dr. John Liebeschuetz (Cambridge Crystallographic Data Centre)

“A New Knowledge-Informed Methodology for Ligand Based Drug Design”

閉会挨拶: Prof. Yasushi Okuno (Kyoto University)

**参加費:** 一般参加者 5,000 円 (学生:1,000 円) 当日会場受付でお支払い下さい。

**懇親会費:** 一般参加者 7,000 円 (学生:5,000 円) 当日会場受付でお支払いください。

**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、2013年10月31日(木)までに以下のメールアドレスまで参加登録をお願いします。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、懇親会参加の有無を明記して下さい。定員になり次第申込みを締め切らせて頂きます。参加登録のない方の当日のご出席はお断りすることがございます。

**参加登録申込み連絡先:** 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](mailto:mokamura@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp)

**宿泊申し込み:** 開催が11月という観光シーズンとも重なりますので、現在JTBによるウェブからの申し込みサイトの開設を準備中です。6月に開設予定です。

種々のアナウンスは以下のHPで随時更新しています。

[http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/autumn\\_school\\_2013.htm](http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/autumn_school_2013.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](mailto:funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp)

TEL: 03-5841-7751