

## 第4回ケモインフォマティクス秋の学校

### 4<sup>th</sup> Autumn School of Chemoinformatics in Tokyo 2015

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>

CAC フォーラム

<http://www.cheminfornavi.co.jp/cac/>

協賛: 日本薬学会

CBI学会

日時: 2015年11月25日(水)~26日(木)

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](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](http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/map01_02_j.html)

この秋の学校は、2年に一度開催される、ケモインフォマティクス分野で国際的に活躍されている著名な先生方が一同に会するめったにないシンポジウムです。創薬などを中心に各先生の新しい視点での研究の取り組みを紹介する“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開発方針を紹介する“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今後の方向性と可能性を直接感じて頂けるものと思います。

【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25日(水)

9:50 開会挨拶: Prof. Kimito Funatsu (The University of Tokyo)

[Tutorial session]

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

“SAR Visualization, Compound Design, and Activity Prediction”

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

“Big data and simulation approaches for drug discovery”

12:00~13:30 Lunch

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

“Data Mining Methods and Chemical Interpretations in Chemoinformatics”

14:30~15:30 Prof. Gisbert Schneider (ETH Zurich)

- “A Philosophy of Chemical Space”
- 15:30~16:00 Prof. Shigehiko Kanaya(NAIST)  
“KNApSAcK Family DB: Data-driven Nutrition Science from Accessibility of Edible Species to Cuisine”
- 16:00~16:20 ----- Break -----
- [Expert session by Software Vendors]
- 16:20~16:40 OpenEye  
Dr. Krisztina Boda  
“Visualizing Chemical Information”
- 16:40~17:00 BIOVIA  
Dr. Dana Honeycutt (BIOVIA Dassault Systèmes)  
“Validation of Statistical Models and Their Predictions Dr. Dana Honeycutt”
- 17:00~17:20 Schrodinger  
Dr. Osamu Ichihara  
“Application of Free Energy Methods and Molecular Dynamics Simulations to Drug Discovery”
- 17:30-19:30 懇親会： 東京大学山上会館談話ホール  
[http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01\\_00\\_02\\_j.html](http://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01_00_02_j.html)

## 11月26日(木)

[Tutorial session]

- 9:30~10:30 Prof. Yoshihiro Yamanishi (Kyushu University)  
“Systematic drug repositioning via omics data analysis with machine learning methods”
- 10:30~11:30 Prof. Andreas Bender (Cambridge University)  
“Integrating Chemical and Biological Data for Compound Selection and Mode-of-Action Analysis”
- 11:30~13:00 Lunch
- 13:00~14:00 Prof. Didier Rognan (Strasbourg Univ.)  
“PDB-scale detection of ligandable cavities at protein-protein interfaces”
- 14:00~15:00 Prof. Kurt Varmuza (Technical University of Vienna)  
“Selected aspects of 40 years applied chemometrics”
- 15:00~15:30 ----- Break -----

15:30~16:30 Prof. Alexandre Varnek (Strasbourg University)  
“Chemoinformatics approaches to synthetic organic reactions: from empirical to predictive chemistry”

[Expert session by Software Vendors]

16:30~16:50 Ryoka System  
Seiichi Kobayashi  
“CIMPL: A new cheminformatic platform for medicinal chemists”

16:50~17:10 Optibrium Dr. Matthew Segall, Hulinks Dr. Sumie Tajima  
“Similarity to SAR - Interactive Navigation of Similarity Relationships to Guide Optimization”

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、2015 年 11 月 6 日(金)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。

**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)

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\\_2015.htm](http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/autumn_school_2015.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