

## ケモインフォマティクスに関する国際シンポジウム

主催： 日本化学会情報化学部会

協賛： 日本薬学会構造活性相関部会

日時： 2009年11月24日10時～17時

場所： 東京大学山上会館（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)

10:00

Opening remarks

Prof. Kimito Funatsu (The University of Tokyo)

10:10 – 11:10

Chemoinformatics - A New Discipline with a Long Tradition

Prof. Dr. Johann Gasteiger (Molecular Networks GmbH, Germany)

11:10 – 12:10

New strategies for structure-property modeling

Prof. Alexandre Varnek (Université Louis Pasteur, France)

13:30 – 14:00

Understanding the nature of structure activity relationship

Prof. Takashi Okada (Kwaisei- Gakuin University, Japan)

14:00 – 15:00

Adaptive systems in virtual molecular design

Prof. Dr. Gisbert Schneider (Johann Wolfgang Goethe-University, Germany)

----- Coffee Break -----

15:30 – 16:00

Development of a simple nonparametric regression analysis (SANORA)

Prof. Tatsuya Takagi (Osaka University, Japan)

16:00 – 17:00

Toward a quantitative definition of the applicability domain in QSAR

Prof. Roberto Todeschini (University of Milano-Bicocca, Italy)

17:00 – 19:00

Reception（山上会館談話ホール）

・参加登録〆切：2009年10月30日（金）

・以下の Web サイトより登録してください。定員先着 100 名まで。

URL：[http://cicsj.csj.jp/i\\_sympo/](http://cicsj.csj.jp/i_sympo/) \*受付は 8 月 1 日からとなります。

・参加費・懇親会費は参加登録と同時に指定の口座へ振り込みください。参加費・懇親会費の振り込みをもって参加登録の確定とします。

・参加費：日本化学会情報化学部会員：10,000 円、非会員：15,000 円  
学生：3,000 円

・懇親会費：5,000 円

【世話人・連絡先】

〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

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 公人

TEL: 03-5841-7751

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