# ケモインフォマティックス秋の学校

## 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
CAC フォーラム
http://www.cheminfonavi.co.jp/cac/
協賛: 日本薬学会
CBI 学会
日時: 2013 年 11 月 27~28 日
場所: 奈良県立新公会堂能楽堂
アクセス: http://www.shinkokaido.jp/welcome/

ケモインフォマティッ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ッ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]

Chair Dr. J. B. Brown

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

"Exploring Activity Cliffs in Chemoinformatics and Medicinal Chemistry"

Chair Prof. Juergen Bajorath

11:00~12:00 Dr. J. B. Brown (Kyoto University)

" Systems Chemical Biology via Computational Compound-Protein Interaction Prediction: Core Ideas, Translational Validity, and Important Perspectives "

12:00~13:30 Lunch

Chair Prof. Alexandre Varnek

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

"Bayesian statistics for drug design"

Chair Prof. Kurt Varmuza

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 Venders]

Chair Dr. Hiromasa Kaneko

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"

18:30-20:30 懇親会: 奈良国立博物館地下レストラン(Banquet: Nara National Museum )

URL: http://www.narahaku.go.jp/english/index_e.html

## 11 月 28 日

[Tutorial session]

Chair Prof. Gisbert Schneider

9:00~10:00 Prof. Didier Rognan (Strasbourg Univ.)

" Computational methods to profile bioactive ligands"

Chair Prof. Didier Rognan

10:00~11:00 Prof. Gisbert Schneider (ETH Zurich)

"From chaos to order by adaptive molecular design"

11:00~11:15 -------- Break ---------

Chair Prof. Shigehiko Kanaya

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

Chair Prof. Johann Gasteiger

13:30~14:30 Prof. Kurt Varmuza (Technical University of Vienna)

"Variable selection for multivariate models - myth and reality"

Chair Dr. Kiyoshi Hasegawa

14:30~15:30 Prof. Alexandre Varnek (Strasbourg University)

"Chemography concept in Chemical Space analysis"

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

[Expert session by Software Venders]

Chair Dr. Kiyoshi Hasegawa

16:00~16:30 PerkinElmer-Spotfire

Dr. Naotaka Oishi (PerkinElmer Japan)

"Accelerating Research Process by Visual Analytics"

16:30~17:00 Accerlys

Dr. Yuji Takaoka (Accerlys Japan)

"Chemoinformatics tools in Accelrys Enterprise Platform"

17:00-17:30 化学情報協会・英国 CCDC

Dr. Jason Cole (Cambridge Crystallographic Data Centre)

"A New Knowledge-Informed Methodology for Ligand Based Drug Design"

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