

第5回ケモインフォマティクス秋の学校

5th Autumn School of Chemoinformatics in Nara, 2017

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.cheminforavi.co.jp/cac/>

協賛: 日本薬学会

CBI学会

日時: 2017年11月15日(水)~16日(木)

場所: 奈良春日野国際フォーラム

アクセス: <http://www.i-ra-ka.jp/iraka/access/>

2年に一度、ケモインフォマティクス分野の世界的に著名な先生方が一同に会する国際シンポジウムです。創薬、材料設計、プロセス設計などを中心に各先生の新しい視点での最新の取り組みについてご講演頂きます。また、ソフトウェア・ベンダーによる最新ソフトウェア動向の紹介も併せて行います。化学・生物・材料のビッグデータ解析の先端を行くケモインフォマティクスの新しい取り組み、そしてその創薬・材料設計における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)、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15日(水)

10:00 Opening remarks: Prof. Kimito Funatsu (The University of Tokyo)

[Tutorial session]

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

"Extending Fundamental Concepts for Chemoinformatics: From First to Second Generation Scaffolds, from Activity Cliffs to Promiscuity Cliffs"

11:00~11:50 Dr. Kiyoshi Hasegawa (Chugai Pharmaceutical Co.)

"Activity Landscape and Its Application to Molecular Design"

12:00~13:30 Lunch

13:30~14:20 Prof. Gisbert Schneider (ETH Zurich)

"Automating drug discovery"

14:20~15:10 Prof. Manabu Sugimoto (Kumamoto University)

"Electronic-Structure Informatics for Discovery/Design of Functional Molecules"

15:10~15:40 ----- Break -----

15:40~16:30 Prof. Johann Gasteiger (Erlangen-Nuernberg University)

“Chemoinformatics - From Synthesis Design to the Prediction of Material Properties”

16:30~17:20 Dr. Yoshifumi Fukunishi (Advanced Industrial Science and Technology (AIST))

“Some prediction models for protein-compound interactions in computer-aided drug development

[Expert session by Software Vendors]

17:20~17:40 OpenEye

“Visualizing ligand-protein interactions”

Dr. Krisztina Boda

17:40~18:00 DS BIOVIA KK

“What to make next? Guiding drug design with in silico modeling” “Effective

Machine Learning for Big Data and Small Data.”

Dr. Dana Honeycutt

18:30~20:30 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

11月16日(木)

[Big data session]

9:00~9:20 Prof. Kimito Funatsu (The University of Tokyo)

9:20~9:40 Prof. Yasushi Okuno (Kyoto University)

9:40~10:00 Dr. Makoto Taiji (RIKEN)

10:00~10:20 Prof. Kenji Hori (Yamaguchi University)

10:20~10:50 ----- Break -----

[Tutorial session]

10:50~11:40 Prof. Didier Rognan (Strasbourg University)

“PDB-scale identification of druggable cavities at or nearby protein-protein Interfaces”

11:40~12:30 Prof. Yoshihiro Yamanishi (Kyushu University)

“Data-driven drug discovery and repositioning by machine learning”

12:30~14:00 Lunch

14:00~14:50 Prof. Alexandre Varnek (Strasbourg University)

“Generative Topographic Mapping: an universal tool for chemical data visualization and modeling”

14:50~15:40 Prof. Thierry Langer (Vienna University)
"Dynamic Pharmacophores: A New Way to Enhance Virtual Screening Screening Efficacy in Early Drug Discovery"

15:40~16:00 ----- Break -----

16:00~16:50 Prof. Shigehiko Kanaya (Nara Institute of Science and Technology)
“Integration of data-intensive science between chemo- and bio-informatics based on KNApSAcK DB”

[Expert session by Software Venders]

16:50~17:10 MOLSIS
“MOEsaic: Integrated Web Application for SAR Analysis”
Mr. Takashi Ikegami

17:10~17:30 CONFLEX
“Predictions of conformational and packing polymorphs for organic Molecules”
Mr. Shigeaki Obata

17:30~17:50 Affinity Science
“Modern approaches for hit finding and molecular design in early drug discovery research”
Dr. Sharon Bryant(Inte:Ligand)

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

参加費: 一般参加者 5,000 円 (学生:2,000 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、2017 年 10 月 30 日(月)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

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。宿泊予約は早めにお問い合わせ致します。

種々のアナウンスは以下のHPで随時更新しています。また、講演順序については変更される場合がありますので最新のプログラムをご確認ください。

<http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/2016/09/20/the-fifth-autumn-school-will-be-held-in-2017/>

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