

全体スケジュール

	12月5日	12月6日
10:00-10:30		
10:30-11:00	開始	
11:00-11:30	ポスターセッション・概要	口頭発表 O02-O03 (座長：原田 俊幸) O04-O06 (座長：川下理日人)
11:30-12:00		
12:00-12:30		
12:30-13:00	幹事会・昼休み	昼休み
13:00-13:30		
13:30-14:00	特別講演・日比孝之 グレブナー基底と医薬統計 (座長：高木達也)	招待講演1・福澤薫 (座長：仲西功)
14:00-14:30		
14:30-15:00	ポスターセッション	招待講演2・石原司 (座長：河合健太郎)
15:00-15:30		
15:30-16:00		SARプレゼンテーションアワード表彰 ・閉会
16:00-16:30		

プログラム

第一日目 12月5日(水)	
	10:00 開場
	10:30-11:00 開会の挨拶
	11:00-12:00 ポスターセッション・ショートプレゼンテーション
	12:00-13:30 昼休み
	13:30-14:30 特別講演
S01	グレブナー基底と医薬統計 日比孝之(阪大院情報)
	14:30-16:30 ポスターセッション
P01	2Way-TFS 法による構造プロファイリングと化学物質の魚毒性予測への応用 ○桑畑恵梧(豊橋技科大院工)、石川翼(豊橋技科大院工)、桂樹哲雄(豊橋技科大院工)、高橋由雅(豊橋技科大院工)
P02	天然物質のスマールデータセットとしての 3DMET サブセット ○前田美紀(農研機構・高度セ)
P03	N 末端グルタミン残基のピログルタミル化機構の解析 ○仲吉朝希(名城大院薬、金沢大院医薬保)、加藤紘一(金城学院大薬、名城大院薬)、栗本英治(名城大院薬)、小田彰史(名城大院薬、金沢大院医薬保、阪大蛋白研)
P04	原子フラグメント法による化学物質の蒸気圧の推算 ○松本卓也(豊橋技科大院工)、桂樹哲雄(豊橋技科大院工)、高橋由雅(豊橋技科大院工)
P05	分子進化アルゴリズムを利用した CDK2 阻害剤の分子設計 ○河合健太郎(摂南大薬)、佐藤和之(摂南大薬)、樽井敦(摂南大薬)、軽尾友紀子(摂南大薬)、表雅章(摂南大薬)

- P06 三次元的電子状態トポロジーの類似性評価手法の開発と構造活性相関解析への応用
○井上貴文(熊本大院自然科学)、杉本学(熊本大院先端科学・東大先端研)
- P07 キナーゼアデニンポケットのタイプ分類と各タイプにおけるアデニンバイオアイソスターの解析
○山乙教之(北里大薬)、広野修一(北里大薬)
- P08 分子動力学シミュレーションを用いたビタミン D 受容体リガンド結合ドメインの溶液構造解析
○浴本亨(横浜市大)、工藤崇文(横浜市大)、山根努(横浜市大)、池口満徳(横浜市大、理研)
- P09 電子状態インフォマティクスを用いた脂肪酸合成酵素(FAS)阻害剤の構造活性相関解析
○井手尾俊宏(熊本大院自然科学)、杉本学(熊本大院先端科学・東大先端研)
- P10 FMO 計算による H-PGDS 阻害剤及び保存水の相互作用解析
○高谷大輔(理研 BDR)、伊中浩治(丸和栄養食品(株))、大村明史(旭化成ファーマ(株))、竹貫健二(旭化成ファーマ(株))、河西真史(旭化成ファーマ(株))、矢吹有香子(理研 BDR)、中川ゆかり(理研 BDR)、津金沢恵子(理研 BDR)、小川直子(理研 BDR)、渡邊千鶴(理研 BDR)、本間光貴(理研 BDR)、有竹浩介(第一薬科大)、裏出良博(筑波大)、白水美香子(理研 BDR)、田仲昭子(理研 BDR)
- P11 *in silico* フラグメントマッピング法による BACE1 阻害剤のバーチャルスクリーニング
○吉田智喜(北里大薬)、広野修一(北里大薬)
- P12 電子状態インフォマティクスと天然物データベースを活用した生体アミン受容体アンタゴニストの探索
○森川郁美(熊本大院自然科学)、荒川正幹(宇部高専)、太田広人(熊本大院先端科学)、杉本学(熊本大院先端科学・東大先端研)
- P13 Cathepsin との選択性向上を狙った Calpain 阻害剤の設計
○幸瞳(理研 BDR)、橋爪良信(理研 DMP)、津吹聡(理研 BSI)、西道隆臣(理研 BSI)、本間光貴(理研 BDR)

- P14 **熱力学・構造情報に基づく蛋白質のリン酸基認識機構の解明と分子設計の探索**
○河出来時(東大工)、黒田大祐(東大工)、中木戸誠(東大工)、Caaveiro Jose(九大工)、奥村繁(Abwiz bio. Inc)、丸山俊昭(Abwiz bio. Inc)、津本浩平(東大医科研)
- P15 **電子状態インフォマティクスによる構造活性相関解析とその応用**
○杉本学(熊本大院先端科学・東大先端研)
- P16 **低分子シャペロン α -1-C-tridecylIDAB による β -glucocerebrosidase の立体構造安定化の解析**
○中込泉(北里大薬)、山乙教之(北里大薬)、広野修一(北里大薬)
- P17 **フラグメント分子軌道法による HIVgp120 と抗体との相互作用解析**
○松浦敦(近畿大理工)、川下理日人(近畿大理工)
- P18 **金属プロテアーゼ Shh に対する抗体 5E1 の熱力学・速度論解析**
○金田生穂(東大院工)、黒田大祐(東大院工)、中木戸誠(東大院工)、長門石暁(東大医科研、東大院工)、津本浩平(東大院工、東大医科研)
- P19 **フラグメント間相互作用エネルギーによる自由エネルギー変化予測の検証**
○富士寛文(近畿大理工)、川下理日人(近畿大理工)
- P20 **MAP2K7 のアロステリック型阻害剤の可能性**
○村川優花(大阪府大院理)、橋本拓磨(大阪府大院理)、曾我部祐里(大阪府大院理)、澤匡明(カルナバイオサイエンス)、木下誉富(大阪府大院理)
- P21 **異なる試験魚種を用いた魚類短期毒性(96h-LC50)に関する QAAR 解析**
○石川翼(豊橋技科大院工)、桂樹哲雄(豊橋技科大院工)、高橋由雅(豊橋技科大院工)
- P22 **一般化学物質に志向した魚類慢性 ELS 毒性予測手法の提案**
○古濱彩子(国立環境研)、林岳彦(国立環境研)、山本祐史(国立環境研)
- P23 **アスパラギン残基の非酵素的な C 末端側ペプチド結合切断機構の量子化学計算による解析**
○加藤紘一(金城学院大薬、名城大薬)、仲吉朝希(名城大薬)、塚本喜久雄(金城学院大薬)栗本英治(名城大薬)、小田彰史(名城大薬、阪大蛋白研)
- P24 **原子フラグメント法を用いた化学物質の魚毒性予測:拡張データセットにもとづく毒性フラグメント定数の再検討**
○藤井祐麻(豊橋技科大院工)、石川翼(豊橋技科大院工)、桂樹哲雄(豊橋技科大院工)、高橋由雅(豊橋技科大院工)

- P25 **NTG のいろいろな表現レベルを利用した多段階構造類似性検索**
○高橋洸樹(豊橋技科大院工)、桂樹哲雄(豊橋技科大院工)、高橋由雅(豊橋技科大院工)
- P26 **3次元格子点に基づくタンパク質特性記述子を用いた網羅的なタンパク質-リガンド相互作用予測手法の開発**
○川崎惇史(北里大院薬)、西端芳彦(北里大院薬)
- P27 **分子行列の固有値を用いた化学物質の沸点の予測**
○山下希流(豊橋技科大院工)、桂樹哲雄(豊橋技科大院工)、高橋由雅(豊橋技科大院工)
- P28 **Atg4B 阻害を作用点とする選択的オートファジー阻害を作用点とする選択的オートファジー**
○遠藤智史(岐阜薬大)、藤田芽衣(岐阜薬大)、内堀麻衣(岐阜薬大)、陶山 美穂(岐阜薬大)、馬彪(岐大院連創)、本田諒(岐大院連創)、鎌足雄司(岐大科基セ)、桑田一夫(岐大院連創)、松永俊之(岐阜薬大)、五十里彰(岐阜薬大)

第二日目 12月6日(木)	
10:00-11:00 口頭発表	
O01	中止
O02	機械学習を用いた医薬品の有害事象の予測モデル構築の検討 ○俣 颯(阪大院薬)、高木達也(阪大院薬)、日比孝之(阪大院情報)、望月麻衣(阪大薬)、森脇寛智(阪大院薬)、田雨時(阪大院薬)
O03	インビトロ試験データを用いた分子レベルのイベントによる肝毒性予測 ○城島光司(阪大院薬)、山田隆志(国立衛研)、広瀬明彦(国立衛研)
11:00-12:00 口頭発表	
O04	ドッキングシミュレーションを活用した定量的構造活性相関の精度の向上 ○江尾知也(明治大理工)、金子弘昌(明治大理工)
O05	高選択性 CK2a1 阻害薬の創出を目指した hematein の作用機序の解明 ○露口正人(大阪府大理)、仲庭哲津子(阪大蛋白研)、仲西功(近畿大薬)、木下誉富(大阪府大理)
O06	量子化学計算とプローブ分子に基づいた分子相互作用場の算出とタンパク質-リガンド相互作用解析への応用 ○早川大地(昭和大薬)、渡邊友里江(昭和大薬)、合田浩明(昭和大薬)
12:00-13:30 昼休み	
13:30-15:30 招待講演	
I01	フラグメント分子軌道法に基づく創薬基盤の構築 福澤薫(星薬大)
I02	構造活性相関の自動探索: 自動設計と自動合成が融合するロボット創薬の幕開け 石原司(産総研)
15:30-16:00 SAR プレゼンテーションアワード表彰・閉会の挨拶	