



**日時:** 2008年10月16日(木)~17日(金)

**場所:** SGI ホール(恵比寿)

(東京都渋谷区恵比寿 4-20-3 恵比寿ガーデンプレイスタワー B1 階)

**参加費:** 無料 【要事前登録】

**URL:** <http://www.ipab.org/IPAB2008-AHeDD2008-Joint-Symposium>

主催: 特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ (IPAB)  
AHeDD 2008 実行委員会

協賛: (依頼中を含む)

東工大グローバルCOE「計算世界観の深化と展開」

日本バイオインフォマティクス学会

CBI 学会

人工知能学会

情報処理学会 (バイオ情報学研究会, 数理モデル化と問題解決研究会)

ハイパフォーマンスコンピューティング研究会)

Bioinformatics and Molecular Design Research Center (BMDRC), Korea


Drug Discovery and Design Center (DDDC), China

シンポジウムのテーマ:

アクセラレータ技術(GPGPU, Cell/B.E. 他)とその生物医学的応用、製薬支援のための計算技術(virtual screening, ADME, 等)、医療情報学、その他のバイオインフォマティクスまたは計算生物学に関連した話題。

使用言語: 第1日: 日本語および英語

第2日: 英語



## ご挨拶

特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ(IPAB)は、並列処理やグリッド技術などの最先端の情報工学の手法を最大限に活用することにより生命科学の難問の解決に貢献し、その成果の産業化および社会還元を目指しています。1999年に任意団体として出発して以来、バイオインフォマティクス技術を中心とした啓蒙と異分野間の人的交流に努めて参りました。毎年のシンポジウムは、会員以外の方々に広く情報を発信する場として特に力を入れてきました。

本年の第9回シンポジウムは、「創薬・ゲノム・医療情報処理のアクセラレーション」というテーマを掲げ、初めて2日間の連続開催としました。第一日は、平成20年度に設置した3つのワーキンググループの主査がそれぞれ企画し、アクセラレータ技術、医療情報学、創薬情報学の3分野のセッションを用意しています。学界及び産業界で先端的な活躍をされている方々に御講演をお願いすることができました。今年は特に、韓国・中国・日本などのアジア諸国の創薬支援研究者が集まる AHeDD プロジェクトの第5回シンポジウム(AHeDD2008)と合同開催の形を取ることになり、第2日はAHeDDに関連した海外の著名研究者をお呼びした国際的なセッションを企画しました。各国の学会長クラスの先生方から、気鋭の若手研究者までが広く参加されます。IPABではAHeDD(Asia Hub for e-Drug Discovery)プロジェクトを支援し国内に紹介していく予定です。海外参加者を中心としたポスター発表も開催します。恒例の企業展示も是非お楽しみ下さい。

## Overview

Initiative for Parallel Bioinformatics (IPAB) was founded in 1999 and is a formal non-profit organization. IPAB is a group of individual researchers and private companies aiming at contributing to the research and industrialization of bioinformatics and biomedical computing, by means of state-of-the-art information technologies, like as parallel processing, Grid technology, machine learning, knowledge processing, etc. IPAB2008 is the 9th annual symposium of IPAB and in this year it will be held as a joint event with AHeDD2008.

Asia Hub for e-Drug Discovery (AHeDD) is an international research collaboration group founded in 2004, aiming at exchange of latest ideas and results on computational methods for drug discovery, and also construction of an Asian research community for sharing knowledge, training people, and incubating new business in e-drug discovery. In 2008 IPAB has decided to contribute to AHeDD activity as a Japanese brunch of AHeDD. AHeDD2008 is the fourth international workshop by AHeDD community, which succeeds previous AHeDD2005 (Jeju), AHeDD2006(Seoul), and AHeDD2007(Shanghai). For details, please visit the AHeDD www page at <http://www.e-drugdiscovery.org>.





## IPAB2008 / AHeDD2008 合同シンポジウム

### プログラム (ver.2.3, Aug.25)

## 第1日: 10月16日(木) “IPABの新展開”

#### 10:00-10:05 開会の御挨拶

秋山 泰 (IPAB 理事長 / 東京工業大学)

#### 10:05-11:45 セッション1: アクセラレータ技術

企画: 小西史一 (IPAB 副理事長, アクセラレータ WG 主査 / 東京工業大学)

10:05-10:35 佐貫俊幸 (日本アイ・ビー・エム (株) 技術理事)

“ペタ・スケール・コンピューティングに向けての挑戦”

10:35-11:05 田村陽介 ((株) フィックスターズ CTO)

“Cell/B.E.におけるソフトウェア開発の現状と応用事例”

11:05-11:35 橋本昌嗣 (日本 SGI (株) CTO)

“GPU コンピューティングの可能性” (仮題)

11:35-11:45 小西史一 (東京工業大学)

“IPAB におけるアクセラレータ WG 活動の紹介”

#### 11:45-13:00 昼休み

企業によるランチョンセミナー (参加無料) を企画中

企業展示、および学術ポスター展示

#### 13:00-13:50 特別講演

萩原兼一 (大阪大学 大学院情報科学研究科)

“GPGPU による医用画像処理について”

#### 13:50-15:20 セッション2: 医療情報学

企画: 日紫喜光良 (IPAB 理事, 医療情報学 WG 主査 / 東邦大学)

13:50-14:20 日紫喜光良 (東邦大学 理学部情報科学科)

“IPAB における医療情報学への取り組み”

14:20-14:50 鈴木 穰 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科)

“次世代シーケンサーを用いた完全長 cDNA の解析”

14:50-15:20 水島 洋 (東京医科歯科大学 大学院疾患生命科学部)

“診療情報と分子情報の網羅的データベース (iCOD) の構築”

**15:20-16:00** コーヒーブレイク

企業展示、および学術ポスター展示

**16:00-17:30** セッション3：創薬情報学と AHeDD

企画：秋山 泰（IPAB 理事長，創薬情報学 WG 主査 / 東京工業大学）

16:00-16:30 Prof. Kyoung Tai No (Yonsei University / BMDRC, Korea)

“Development of e-Organ and It's Application for Drug Repositioning”

16:30-17:00 広川貴次（産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター）

“活性部位形状フィンガープリントを用いたバーチャルスクリーニング”

17:00-17:30 Prof. Weiliang Zhu (DDDC, SIMM, China)

“Exploring Functional Conformations of Target Protein for Drug  
Discovery by Molecular Dynamics”

**17:30** 終了予定

**18:00-20:00** 懇親会

ビヤステーション恵比寿（恵比寿ガーデンプレイス内）

参加費 2,000 円（予定）



## 第2日：10月17日(金) “Asia Hub for e-Drug Discovery”

10:00 開場

10:30-10:45 AHeDD プロジェクトの紹介

Prof. Kyoung Tai No (Yonsei University / BMDRC, Korea)

Prof. Weiliang Zhu (DDDC, SIMM, China)

Prof. Yutaka Akiyama (Tokyo Tech, Japan)

10:45-12:15 セッション4: **Frontiers of Drug Discovery Research**

Chair: Prof. Kyoung Tai No (Yonsei University / BMDRC, Korea)

10:45-11:15 Dr. Sungchul Chung (STEPI, Korea)

“Opportunities for S&T Cooperation in East Asia”

11:15-11:45 Prof. Yun Tang (East China Univ. of Science and Technology, China)

“New potential inhibitor binding sites identified in HIV-1 integrase”

11:45-12:15 Dr. Tohru Natsume (BIRC, AIST, Japan)

“Systematic Analysis of Protein Interaction Networks”

12:15-13:30 昼休み

企業展示、および学術ポスター展示

13:30-14:20 特別講演

Prof. Toshihisa Ishikawa (Tokyo Tech, Japan)

“Transporter mechanism-based drug molecular design: High-speed screening, QSAR analysis, and molecular orbital calculation”

14:20-15:50 セッション5: **Challenges for Important Targets**

Chair: Prof. Weiliang Zhu (DDDC, SIMM, China)

14:20-14:50 Prof. Hong Gil Nam (POSTECH, Korea)

“Molecule-Level Imaging of Pax6 mRNA Distribution in Mouse Embryonic Neocortex by Molecular Interaction Force Microscopy”

14:50-15:20 Prof. Baik Lin Seong (Yonsei University, Korea)

“Common Vaccine Platform for Seasonal and Pandemic Influenza”

15:20-15:50 Dr. Tomoko Niwa (Nippon Shinyaku Co., Ltd., Japan)

“Elucidation of Characteristic Structural Features of Protein Kinases: A Neural Network Approach”

15:50-16:30 ポスター発表（講演者の説明付き）  
コーヒーサービス

16:30-18:00 セッション6： **Novel Computing Techniques for Drug Design**

Chair: Prof. Hiroshi Chuman (The University of Tokushima, Japan)

16:30-17:00 Prof. Jianfeng Pei (Peking University, China)

“De novo drug design - to be a more practical approach”

17:00-17:30 Dr. Kunqian Yu (DDDC, SIMM, China)

“Drug discovery Grid of China”

17:30-18:00 Dr. Toshio Watanabe (RICS, AIST, Japan)

“Molecular Orbital Calculation for Large Molecule with Sakurai-Sugiura Method on Grid Computing Environment”

18:00 閉会の辞

## \*ポスター発表リスト

P01: Shen J, Liu GX, Tang Y\* (ECUST): “*In silico* prediction of blood-brain partitioning using a chemometric method called genetic algorithm based variable selection (GAVS).”

P02: Jing Chen, Jianfeng Pei, Dengguo Wei, Qingliang Li, Luhua Lai (Peking Univ.): “Improving virtual screening efficiency by receptor-based pharmacophore model”

P03: Kunqian Yu (DDDC, SIMM): “Drug discovery Grid of China”

P04: Kwang-Hwi Cho, Jeong-Hyun Kim (SoongSil Univ.): “SABA: Secondary structure Assignments program Based on Alpha Carbon”

P05: Ky-Youb Nam, Hanjo Kim (BMDRC): “*In silico* Integrated Drug Profiling System against Influenza Virus”

P06: Jong Young Joung, Hwan You (Yonsei Univ.): “Property-Weighted Vector driven Docking Algorithm Using Solvation Free Energy Density (SFED) model”

P07: Se Han Lee (Yonsei Univ.): “Solvation Free Energy Calculation Method with the SFED Model”

P08: Hyoungjun Son (Yonsei Univ.): “*In silico* prediction for phase II enzyme selectivity of UGT and SULT substrates”

P09: Su Yeon Kim (Yonsei Univ.): “Development of novel chemicals blocking export of glycogen synthase kinase 3 (GSK3) from nucleus to cytoplasm”

P10: Hiroaki Umeda (RICS, AIST)

P11: Kouta Toshimoto, *et.al* (Tokyo Tech): “*In silico* prediction of major drug clearance pathways”

P12: Yutaka Akiyama, *et.al* (Tokyo Tech): “MEGADOCK- A rapid screening system for all-to-all protein docking analysis”