

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第 3 卷第 1 号

2015 年 2 月 28 日発行

CBI 学会誌

第3卷 第1号

2015年2月28日発行

CBI 学会

目次

(1) CBI 学会 2015 年 大会開催概要	1
(2) CBI 学会 2015 年 大会フォーカストセッション等の準備状況	
本間 光貴 (CBI 学会 2015 年大会 プログラム委員長、理化学研究所)	2
(3) 提言論文「私の意見：現代科学の神話 — 水素結合とその周辺」連載にあたって	
西尾 元宏 (CHPI 研究所)	3
(4) 提言論文『私の意見：現代科学の神話 — 水素結合とその周辺 (その 1) 「水素結合神話」』	
西尾 元宏 (CHPI 研究所)	4
(5) CBI ジャーナル便り	
多田 幸雄 (CBI ジャーナル編集委員長、 東京大学創薬オープンイノベーションセンター)	8
(6) 研究会：ご案内と募集	
多田 幸雄 (CBI ジャーナル編集委員長、 東京大学創薬オープンイノベーションセンター)	9
(7) 講演会報告・予告	10
(8) 委員会報告	16

CBI 学会 2015 年大会

大会テーマ：創薬のオープンイノベーション—新領域と *in silico* の接点—
iPS 創薬・アカデミア創薬・ビッグデータ
会期：2015 年 10 月 27 日(火)-29 日(木)
会場：タワーホール船堀(東京都江戸川区船堀 4-1-1)
大会長：堀内 正(慶應義塾大学)
大会実行委員長：片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ株式会社)
プログラム委員長：本間 光貴(理化学研究所)

開催趣旨：

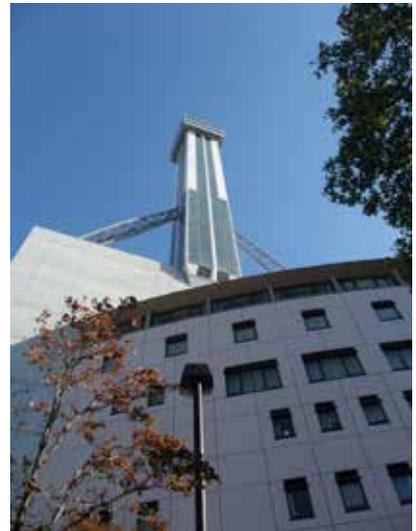
近年、様々な産業でクローズドイノベーションのビジネスモデルは限界を迎えており、オープンイノベーションで活路を見出そうとする動きが盛んになっています。なかでも創薬研究は多様な研究領域を取り込んだ総合科学の研究であり、非常に多くの最新技術を常に取り入れることが必要となっていることから、旧来のクローズドイノベーションは機能しなくなってきました。このような状況下、創薬においてオープンイノベーションに対する期待は極めて高く、既に多くのトライアルが実践されています。そのための産官学の緊密な連携がこれまでになく求められていることは言うまでもありません。

2015 年は新独立行政法人の「日本医療研究開発機構」が設立される年であり、オープンイノベーションの必要性が益々高まって来ている基礎研究から、迅速な橋渡し研究(TR)を介して、臨床研究—治験を十分に行えるような基礎・臨床研究の一体化するシステムが構築される年でもあります。

このような状況の中で、2015 年の CBI 大会では創薬のオープンイノベーションに焦点をあて開催することにいたしました。創薬におけるオープンイノベーションの対象は非常に幅広い研究領域にまたがっていますが、CBI 学会の基盤である *in silico* 研究は創薬のオープンイノベーションを幅広く推進するにあたり、重要な役割を果たすことは明らかだと思います。そのために多様な研究領域と具体的にどう関わっていくべきか、活発な議論ができればと考えております。今回は特に注目度の高い 1) iPS 創薬、2) アカデミア創薬、3) ビッグデータの 3 つのトピックに絞り、議論を深めることといたしました。

様々な立場のかたが、様々な研究領域に関して議論を深め、お互いどのように連携していくべきか、本会が具体的なヒントを提示するとともに研究者間での交流の場を提供できれば幸いです。

創薬のオープンイノベーションに関わっている方々、あるいは興味をお持ちの方々の積極的なご参加をお願いいたします。



タワーホール船堀

参加登録受付：2015 年 5 月 7 日(木)～10 月 16 日(金)

ポスター投稿受付：2015 年 5 月 7 日(木)～8 月 31 日(月)

大会ホームページ：<http://cbi-society.org/taikai/taikai15/index.html>

2015 年大会 フォーカストセッション等の準備状況

2015 年大会 プログラム委員長
本間 光貴 (理化学研究所)

CBI 学会 2015 年大会のプログラム委員会が 1 月 29 日に開催され、いよいよ今年の大会のフォーカストセッション、ポスターセッションの企画が始まりました。

皆さんは CBI 大会のフォーカストセッションにどのような印象をお持ちでしょうか? 昨年までは講演会形式のものが多かったこともあり、単に小さな会場で開かれるミニセミナーのように感じる方も多かったかもしれません。今年からは、大きな会場で行われるプレナリーや招待講演とはなるべく差別化して、異分野交流や学際領域での研究コミュニティの形成を促進する CBI 学会らしい特色のあるセッションに徐々に変えていきたいと考えています。そのために、現在、CBI 学会にある 5 つの学問分野の分野長を中心に今年のフォーカストセッションの企画を練っていただいております。形式も講演会形式だけではなく、研究者同士が現状の問題点や今後の方向性を議論しやすいようにパネルディスカッションやラウンドテーブルディスカッション、ポスターセッションとの連携などの形式を取り入れていきたいと考えています。

また、フォーカストセッションは一般公募も受け付ける予定 (5 月 7 日に 2015 年大会ホームページで募集を開始します) です。各分野の企画の他、ここ数年好評な企画や一般からの企画も入れて、最終的には 10 個程度のフォーカストセッションを開催したいと考えています。

ポスター発表に関しては、投稿受付期間を 5 月 7 日(木)から 8 月 31 日(月)に設定することが決定しました。締め切りの 8 月 31 日は、区切りの良い日にちで覚えやすいと思いますので、ぜひ夏までに温めた研究成果を(早めに)投稿していただければと思います。



Focused Session



2014 年大会フォーカストセッション風景

提言論文

「現代科学の神話 — 水素結合とその周辺」 連載にあたって



西尾 元宏

CHPI 研究所

町田市南大谷 705-6-338
<http://tim.hi-ho.ne.jp@dionisio>

CBI 学会誌に「現代科学の神話 — 水素結合とその周辺」と題して意見を述べることにした。同誌に掲載される論文には総説のほか研究論文、提言論文、解説論文、紹介論文があるが、ここに述べるのは私の「意見」であって提言の範疇に入る。内容は多岐に亘るので連載とするが読者からの率直な反論やコメントを期待している。

シリーズ 「私の意見：現代科学の神話」

1. 水素結合とその周辺 (その1) : *本号掲載
 - 水素結合とはなにか、○生体高分子の3D 構造はなんで決まるか、○アンフィンセンの実験、○タンパク質の3D 構造形成に水はどこまで重要か、○論理的薬物設計
2. 水素結合とその周辺 (その2) : 疎水結合神話
3. 水素結合とその周辺 (その3) : 弱い水素結合概説
4. 水素結合とその周辺 (その4) : CH/ n 水素結合概説
5. なんでも軌道効果 (2次軌道効果はあるか)、(アノマー効果の原因)
6. 科学の研究と流行 (Impact Factor、h-index さわぎ)

私の意見：現代科学の神話 - 水素結合とその周辺 (その 1) 「水素結合神話」

西尾 元宏

CHPI 研究所 <http://tim.hi-ho.ne.jp@dionisio>

町田市南大谷 705-6-338

E-mail: dionisio@tim.hi-ho.ne.jp

(論文受付日 January 30, 2015; 公開日 February 28, 2015)

要旨：水素結合にまつわる誤った思考様式を「水素結合神話」として捉え、その弊害を、タンパク質の 3D 構造形成とリガンドとの相互作用を例にとりて考察した。また、この観念が論理的薬物設計における制約要因になっていることを述べた。

Abstract : The stereotype thinking about the hydrogen bond has been criticized against current theories or methodologies of protein folding and interaction of proteins with their ligands. The stereotype argument of the hydrogen bond is a *myth* in science of our days and restricts the success in structure-based drug design (SBDD).

キーワード：水素結合神話、タンパク質の 3D 構造、フォールディング、タンパク質／基質相互作用、論理的薬物設計

1. 神話の時代

現代は神話に満ちている。ギリシャ・ローマ神話、北欧、ポリネシア神話など¹神話はいくつでもあるが、ここで「神話」とは比喩的な意味で、人の思惟や行動を非合理的に拘束、左右する理論や固定観念のことである。自然科学の神話²もその一つだ³。

2. 水素結合神話

水素結合そのものは神話でない。水素結合にまつわる多くの論考に神話的な様相がみられるというのが本稿の趣旨である。

3. 水素結合の定義

水素結合力は、ファンデルワールス力、静電的相互作用とならんで、最も一般的な分子間力の一つである⁴。ポーリングは水素結合を定義して、「電子的に陽性な水素と陰性な原子との間にはたらく静電的相互作用」とした[1]。この定義は、ポーリングの著書に直接当たるより最近のレビューを参照するほうが分かりやすい[2]。水素結合は「クーロン力による」と単純に割り切ったポーリングの定義は、化学の進歩につれて現実にあわなくなり、ピメンテルにより、弱い水素結合 (OH/ π , CH/O, CH/ π など)

¹ 古事記や日本書紀など日本の神話は、時の権力が古代の伝承を意図的に操作して作りあげたもの（大山誠一、「天孫降臨の夢 — 藤原不比等のプロジェクト」NHK ブックス 1146, 2009 年）なので、ほかの神話と同列には論じられない。

² 自然科学の神話は他にいくつもあるが、ここでは触れない。

³ 人文科学（歴史学など）、社会科学（経済学など）にも神話がある。

⁴ 水素結合とファンデルワールス力は単独力ではなく、さまざまな相互作用を含む現象的な概念である。これに対し、分散力やクーロン力など静電的相互作用は、それ以上分割できない単独の力である。

を含む一般的な表現に置き換えられた[3][4]。2005 年から 2009 年にかけて、水素結合に関心をもつ結晶化学者、分光学者、理論（計算）化学者が会合と討論を繰り返し、2011 年に International Union of Pure and Applied Chemistry（国際理論・応用化学連合）より IUPAC Report[5]として刊行された。レポートの全文を読むのもいいが、手頃の解説記事[6]があるのでお勧めしたい。

4. 水素結合の特徴

「水素結合神話」にふれる前に、水素結合の特徴について述べておこう。最も一般的な水素結合の特徴はその方向性である。いくつも同時にはたらくことも性質の一つだ。共有結合にくらべて弱いことも特徴だが、水素結合のエネルギーには大きな幅があるので要件とはいえない。

水素結合の性質を考えると忘れてならないことは、これが「極性溶媒中では殆どはたらかない」ことである。極性溶媒（polar solvent; protic solvent）ではクーロン力が約 2 桁小さくなることに加えて、**これと比較にならないほど重要な**のは「溶媒の水自身が相互作用に干渉する」ことである。タンパク質の 3D 構造形成（フォールディング）やリガンドとの相互作用に関する議論の多くは、最も大切なこのポイントを念頭においていない[7]。生理的条件下（水溶媒）で行われるタンパク質の構造形成に水素結合がはたらくことはあり得ない。とりわけ、アルキル基⁵や芳香環を含むアミノ酸側鎖⁶の間にはたらくファンデルワールス力（分散力）や CH/ π 水素結合など非極性の力を丁寧に、まじめに評価する必要がある。

5. 生体高分子の 3D 構造はなんで決まるか

タンパク質二次構造の要素に α -ヘリックスと β -シートがある。ポーリングはこれらの形成に主鎖の NH と CO 間の水素結合が重要なことを示した[8]。注意したいことは、C=O と NH の水素結合に与る残基の組み合わせを決める論理はタンパク質の主鎖にはないことである。ポーリングも、どの残基の CONH とどの残基の NHCO 間に水素結合ができるかには触れていない。つまり、主鎖の配列は、あらかじめ α -ヘリックスをつくるための情報をもって

いない。平たくいえば、各残基の CONH は、どの残基の NHCO を相手として水素結合をすればよいかを知らない。

情報は残基周辺の環境にある。タンパク質分子が水の中でかたちを変え、少しずつ自由エネルギーの低いコンフォメーションに変化する。この状態はタンパク質全体が決める。言い換えれば、必要な情報は一次配列上にある残基の側鎖がもっている。コンフォメーションが自由エネルギー最小の状態になったとき、ある残基の CONH は目の前にある別の残基の NHCO と水素結合して最終の対をつくる。実在のタンパク質の α -ヘリックスにみられる水素結合の対は「結果」であって、「原因」ではない⁷。 β -シートの構造形成についても同じことがいえる[9]。

6. アンフィンセンの実験

リボヌクレアーゼ A はリボ核酸を加水分解する酵素である。124 のアミノ酸からなる小さなタンパク質で、システインを 8 つもち、SS 結合が 4 つある。アンフィンセンは、この酵素の折りたたみ（フォールディング）機構を研究し、タンパク質の 3D 構造は自由エネルギーが最小になるように決まるとした[10]。緩和な還元剤でリボヌクレアーゼ A の SS 結合を切断したうえで変性剤を加えると酵素の活性が失われる。生理活性はタンパク質の 3D 構造と不可分に結びついているからだ。そのままの状態では酸化条件におくと活性が戻らない。遊離した SH 基が手当たりしだいに近くの SH と SS 結合を形成するためである⁸。ところが、変性剤を除去したあと注意ぶかく酸化すると酵素活性が復活する。3D 構造がもとに戻った証拠である。ある SH 基は、ほかのどの SH と結合すればよいかを知らない。正確に元の構造に戻ったわけは、 α -ヘリックスにおける水素結合の場合と同じである。タンパク質全体の構造が情報を与えるのだ。アンフィンセンの実験条件下では、コンフォメーションがほぼ元のまま保たれているので、SH は目の前の SH と結合すればよい。

アンフィンセンの結論には、リボヌクレアーゼ A のように小さなタンパク質に限ることのほか、実験方法などに幾つか条件があり、事柄はそれほど単純ではない[11]。そこで、アンフィンセンの理論を修正しようとする考え方や計算がいくつか報告された[12][13][14]。残基数 8-80 程度の小さなタンパク

⁵ アラニン、バリン、ロイシン、プロリン、メチオニンなど。

⁶ フェニルアラニン、チロシン、トリプトファン。

⁷ 「結果を原因と取りちがえることにまして危険な誤謬はない」。ちくま学芸文庫、ニーチェ全集 14、「偶像の黄昏」（原佑 訳 p.56）

⁸ 8 つの SH 基が任意に相手を選び再びジスルフィド結合をつくる場合は $7 \times 5 \times 3 = 105$ とおりある。すなわち元どおりの構造に復帰する確率（1/105）はきわめて低い。

質では、高速のスーパーコンピューターによる MD 計算でそこそこの結果を得ている⁹[15]。しかし、筆者には、フォールディング機構に関する現在のアプローチでは、3D 構造の予測は困難（少なくとも大きなタンパク質では）ではないかという気がしてならない。1 次配列にはタンパク質の 3D 構造形成に必要な情報は全て含まれている。元の構造を再現するためには、残基の側鎖どうしの相互作用のほか、側鎖とタンパク質の他の部分との相互作用を正當に評価しなければならないと思う。やや古典的だが、 α ヘリックスや β シートに含まれる残基の傾向を基にタンパク質の構造を予測しようとする統計的な方法もある[16]。フォールディング開始部位には芳香族側鎖をもつアミノ酸と嵩高い残基の対が多いという報告もある¹⁰[17]。

7. タンパク質の 3D 構造形成に水はどこまで重要か

次に、タンパク質の 3D 構造形成に水がどのように関与するかを考えよう。タンパク質データベース (Protein Data Bank: PDB) [18] に登録された結晶の 3D 構造をみると水分子が含まれている場合が幾つもある。しかし、これらの水が、生理条件下でその位置に存在していた証拠はあるだろうか。筆者は、タンパク質の 3D 構造が形成される「過程」に水分子が介入する可能性はないと考えている。PDB の結晶構造に記録されている水分子は、結晶化の最終段階で 3D 構造がほぼ形成されたのちに入りこんだ「結果」を示すもので、もともと水の中にあった 3D 構造とはやや違うのではないだろうか。

思考実験として、受容体、酵素などのタンパク質が特異的リガンドと相互作用する場合を考えてみよう。当然ながら、この相互作用は生理的条件（水の中）で行われる。ここで水素結合がはたらくだろうか。そんなはずはない。なぜか。水中の相互作用だからである。水の中でも機能するファンデルワールス力など非極性の力¹¹（疎水力¹² とよぶことが多いが間違いである）がはたらく。

私の考えはこうだ。標的のタンパク質から遠く離れたリガンドが水中で激しく動き回り、偶々受容体（または酵素）の結合部位の近くにきたとする。リガンドの一部分とタンパク質の間に何らかの相互作用がはたらき、結合部位に緩く結合するだろう。

次に起きることはなにか。ふたたび離れて行くか、近傍にしばらく留まり、回転するなどして位置を修正するかのどちらかである。こうした過程を限りなく繰り返し、少しずつ安定な構造に転移し、自由エネルギー最小のリガンド/タンパク質結合体に収束する。こうして受容体のポケットに特異的リガンドがきちんとはまり込む。最終の場面を除いて、中間のプロセスに水素結合がはたらく余地はないと筆者は考えている。

8. 論理的薬物設計

現在の薬物開発は、ランダムスクリーニングによることはまれで、論理的な薬物設計 (Rational Drug Design) によることが普通である。QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) といった古典的 (統計的) な手法もあるが、現今では SBDD (Structure-Based Drug Design) によることが主流である。SBDD にも色々あるが本誌の読者には説明不要だろう。もちろんコンピュータを駆使し、ソフトウェアが供給するプログラムも活用して新薬開発を行う。しかし、「黙って座ればびたりと当たる」ソフトがあるわけもない。あらゆる手法を組み合わせさせて試行錯誤し、苦勞したあげく最終の結論に到達するのが常である。章末の文献に最近の成功例を 2 つ引用した[19][20]。

Pharmacokinetic Optimization in Drug Design という総説集に “Hydrogen Bonding: The Last Mystery in Drug Design” という論考がある[21]。原報を読んで戴ければ分かるが、「水素結合が水の中でも機能する」¹³ という前提に立って薬物設計を考えている。これでは Drug Design がうまく行かないはずである。あえて「Mystery」と呼ぶほどのこともない。水素結合神話の帰結といえよう。水素結合や疎水相互作用の概念だけに基づいて薬物をデザインしようとする試みは挫折せざるを得ない。

近年になって、NMR¹⁴ を用いる薬物開発法の進展が著しい[22]。NMR は結晶解析に比べるとデータの精度が劣り、薬物設計における重要度は副次的なものと考えられてきた、しかし、NMR はリガンドと標的タンパク質の動的な相互作用を扱うために、ある意味で結晶解析¹⁵ より有益な情報を提供するので、これまで以上に使われるようになるだろう。

⁹ 0.6–65 μ s, RMSD (Ca の結晶データと計算値の偏差) 0.5–49 Å : 引用文献 15, Fig. 1 参照

¹⁰ CH/ π 水素結合の関与を思わせる。

¹¹ タンパク質側鎖のアルキル基や芳香性残基との相互作用が重要である。

¹² そんな力はない。いわゆる「疎水力」については次号で論じる。

¹³ 大抵の化学者、生化学者と同じ見解に基づいている。

¹⁴ NOE (H vs. N) で決められた 3D 構造や緩和時間によって情報が得られる。

¹⁵ PDB の結晶構造に問題があればなおのことである。

参考文献

- [1] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*; Cornell University Press: Ithaca, NY, 1939.
- [2] (a) G. Desiraju, *Hydrogen Bridges in Crystal Engineering: Interactions without Borders*, *Acc. Chem. Res.* **2002**, *35*, 565-573. (b) G. Desiraju, *Hydrogen Bonding in Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, **2004**, Marcel Dekker. Inc.
- [3] G. Desiraju, *C-H/O and other weak hydrogen bonds. From crystal engineering to virtual screening*, *Chem. Commun.* **2005**, 2995-3001.
- [4] G. C. Pimentel and A. L. McClellan, *The Hydrogen Bond*, W. H. Freeman and Co., San Francisco, 1960
- [5] E. Arunan et al., *Definition of the hydrogen bond. An account (IUPAC Technical Report)*, *Pure and Applied Chem.* **2011**, *83*, 1619-1636; 1637-1641.
- [6] G. R. Desiraju, *A Bond by Any Other Name*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 52-59.
- [7] 例えば桑島邦博、蛋白質フォールディングの分子機構、分子研レターズ 65 (Feb. 2012) 及び引用文献
- [8] L. Pauling, 前掲書 pp. 498-501, Fig. 12-18.
- [9] L. Pauling, 前掲書 Fig. 12-19, 12-20.
- [10] C. B. Anfinsen, *Principles that govern the folding of protein chains*, *Science* **1975**, *181*, 223-230.
- [11] ヴォート「生化学」上、田宮信雄他訳、東京化学同人、1992, pp. 164-165 参照
- [12] S. E. Jackson, *How do small single-domain proteins fold?* *Folding & Design* **1998**, *3*, R81-R91.
- [13] P. G. Wolynes et al., *Navigating the folding routes*, *Science* **1995**, *267*, 1691-1620.
- [14] D. Baker, *A surprising simplicity to protein folding*, *Nature* **2000**, *405*, 39-42.
- [15] K. Lindorff-Larsen et al., *How fast-folding proteins fold*, *Science* **2011**, *334*, 517-520.
- [16] ヴォート、前掲書、pp. 168-169, 表 8.1 参照
- [17] T. Nakamura et al., *Different folding pathways taken by highly homologous proteins, goat α -lactalbumin and canine milk lysozyme*, *J. Mol. Biol.* **2010**, *396*, 1361-1378.
- [18] <http://www.rcsb>.
- [19] 多田幸雄、SBDD と Classical QSAR によるドラッグデザイン。経口ヌクレオシド系抗悪性腫瘍薬の開発, *SAR News No 26 // Cutting Edge // (Apr. 2014) 4-16*.
- [20] 小林孝光、スピロケタール型 SGL T2 阻害剤 CGS452 (Tofogliflozin) のリード創製と最適化、CBI 学会 2014 年大会、招待講演 I-10、要旨集 p. 38
- [21] H. Kubinyi, *Hydrogen Bonding: The Last Mystery in Drug Design? Pharmacokinetic Optimization in Drug Design*, Wiley-VCH, 2001, pp. 514-524.
- [22] 高橋栄夫、創薬と NMR と計算化学、CBI 学会、第 385 回研究講演会 2015 年 1 月 14 日、バイオ NMR の創薬活用への新展開 要旨集

CBI ジャーナル便り

CBI Chem-Bio Informatics Journal
Chem-Bio Informatics Society

1981年に発足したCBI研究会が2001年にCBI学会となって以来、CBIジャーナルを発刊しておりますが、最近では投稿数が減っているのが現状です。しかし、CBI学会における新たな研究コミュニティ形成を目的とした年会時のフォーカストセッションやFMO、計算毒性学、および個別化医療に関する研究会の活動が論文投稿に繋がることを期待しております。また、Original論文以外にCBI学会の関心領域の各分野からのReviewを掲載していくことに致しました。CBIジャーナル Vol. 15には以下の総説が掲載されます。今後さらに、OpinionやPerspective等を含めて内容の充実を目指しておりますので宜しくお願い致します。

CBI ジャーナル編集委員会



CBI ジャーナル Vol. 15 (2015)

総説：MLogPの各種実装とその推定精度

平野 弘之(独立行政法人理化学研究所 環境資源科学研究センター)

要旨

MLogPは1992年発表の後、使用する記述子とモデルは変更されなかった。しかし現在においても最初の発表を引用した複数のシステムでMLogPが実装され、広く利用されている。本稿ではMLogPを実装した各システムで使用している記述子の内容を確認し、記述子の設定に変更があれば推算値の精度に与える影響を検証した。

実装系によっては、引用された記述子の説明に改変点があり、推算モデルについても再調整されたことが述べられていた。MLogPモデルは各記述子と推算値の関係は明確であるため、自社または公開された化合物データベースの実測LogP値と化合物構造を検証セットとして用いることで、記述子の改変による推算精度は訂正されている。

近年、多数の化合物を用いた大規模なLogP推算法の比較研究がおこなわれ、2つのMLogP実装系(S+)と(D)で推算性能が大きく異なる結果が示された。同じ推算法の精度差はMLogPの記述子設定の曖昧さが原因と指摘されている。本稿では原報に従って曖昧さを排除した記述子を実装したプログラム(M)を使用した。(D)の検証セットの公開化合物データベースから(M)を用いて、各MLogP記述子が現れる頻度を確認したところ、比較研究における大量の化合物群に頻出した記述子とは異なっていた。そのなかで係数の大きい記述子QNの選択に問題があることが示唆された。この問題は記述子の曖昧さによるものではなく形式荷電の設定など実装系の構造認識に影響されることが考えられる。記述子設定を補足したMLogP推算値はクラシカルなモデルながら、実用的な精度を提供している。

CBI ジャーナルは J-STAGE にて論文を公開しています

<https://www.jstage.jst.go.jp/browse/cbij/-char/en>

研究会

ご案内と募集

CBI 学会の活動の一環として、研究会の目的は情報計算化学生物学に関連する特定の研究分野に関心のある研究者のコミュニティ作りにあります。

現在研究会は、FMO 研究会(2012 年設立)、計算毒性学研究会(2014 年設立)および個別化医療研究会(2015 年設立)があり (http://cbi-society.org/home/study_apply.html)、それぞれの研究会は主査、副主査および幹事の先生の方針に基づいて運営がなされております。その具体的な活動としては、研究会の開催に加え、グループウェアによる情報共有ならびに年次大会におけるフォーカストセッションの企画などがあります。尚、通常の研究会への参加は原則無料とし、学生および非会員の研究者を含めて幅広い参加を呼び掛けております。

CBI 学会ホームページ (<http://cbi-society.org/>) のサイトから研究会設立を申し込むことができます。また、CBI 学会の承認後、研究会の活動費として年間5万円が支給されます。

CBI 学会研究会に関してご質問等がありましたら、担当者：多田幸雄 (tada@cbi-society.org) まで、ご連絡下さい。

多田 幸雄 (CBI ジャーナル編集委員長、東京大学創薬オープンイノベーションセンター)

FMO 研究会

設立趣旨：1999 年に北浦らによって開発されたフラグメント分子軌道法 (FMO 法) は、生体分子など巨大分子の電子状態計算法として、着実に発展しています。この FMO 法が、さらに有効かつ幅広く用いられ、特に創薬において実績を積み上げられることを目指して、従来の CBI 学会研究講演会とは別に、参加自由な講演会を企画する FMO 研究会を設立いたします。

主査 古明地 勇人 (独立行政法人産業技術総合研究所)

副主査 北浦 和夫 (神戸大学)

計算毒性学研究会

設立趣旨：世界的、かつ多くの研究分野で毒性 (安全性) に関する重要性が急速に高まっており、特に計算毒性学への期待や役割が急速に拡大している。このような流れを受け、欧米では国家レベルでの研究戦略や研究機関、研究グループ等が立ち上がり、積極的に活動中である。日本では計算毒性学に関する認知度が殆ど無い。このままでは欧米との差が拡大し、日本は計算毒性学研究で発言権を失ってしまう。このような状況を打破する第一歩として、日本で最初となる計算毒性学研究会を設立したい。なお、計算毒性学は多くの研究分野より構成される複合研究である。この点で、多くの研究者が集える研究会形式は最適と言える。

主査 湯田 浩太郎 (株式会社インシリコデータ)

副主査 水間 俊 (松山大学)

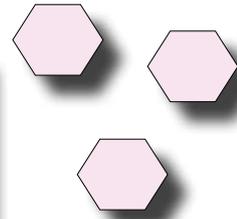
個別化医療研究会

設立趣旨：ゲノム薬理学 (PGx; pharmacogenomics) およびバイオマーカー研究の進展により治療の最適化が図られる。製薬企業は PGx を用いた医薬品あるいはコンパニオン診断薬の開発により個別化医療の実現を目指している。個別化医療の進展は創薬から上市、さらに医療の現場に至る様々な段階において変化をもたらす。本研究会は、アカデミアおよび企業の基礎研究者、最終的な臨床アウトカムに接する臨床家、および行政の各分野の参加者を対象とし、将来、本邦において個別化医療分野を推進していく人材の養成を目指す。

主査 中村 光浩 (岐阜薬科大学 実践薬学大講座 医薬品情報学研究室)

副主査 永澤 秀子 (岐阜薬科大学 創薬化学大講座 薬化学研究室)

講演会記録



第 356 回 CBI 学会 講演会

「動き出すアカデミア創薬－アカデミア創薬シーズの活用，オールジャパンの創薬体制を目指して－」

日時：2014 年 12 月 2 日（火） 13:15-17:45

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル タワー B 10 階 カンファレンスルーム B05-B07
（大阪市北区大深町 3-1）

共催：大阪イノベーションハブ

世話人：塩田 武司（塩野義製薬）、木下 誉富（大阪府立大学）、志水 隆一（都市活力研究所）

プログラム：

- (1) 13:15-13:20 開催の挨拶
- (2) 13:20-13:30 大阪イノベーションハブより
中村 純二（大阪市経済戦略局）
- (3) 13:30-14:20 「新大阪大学未来戦略機構第六部門での取り組みについて」
土井 健史（大阪大学薬学研究科）
- (4) 14:20-15:10 「アカデミアシーズからの in silico ドラッグデザイン研究」
仲西 功（近畿大学薬学部 創薬科学科）
- (5) 15:30-16:20 「オールジャパンでの核酸創薬に向けた新たな取り組み」
小比賀 聡（大阪大学薬学研究科・医薬基盤研究所）
- (6) 16:20-17:10 「オールジャパンでのアカデミア創薬の加速に向けて
～産学官連携による抗体医薬開発とその支援にフォーカスして～」
堤 康央（大阪大学薬学研究科・医薬基盤研究所）
- (7) 17:10-17:30 「創薬支援戦略室の取り組みの現状について」
有馬 賢治（医薬基盤研究所 創薬支援戦略室）
- (8) 17:30-17:55 まとめと総合討論

開催報告：

創薬研究の生産性向上は製薬企業にとって喫緊の課題であるが、経済再興を目指す現政権においても健康・医療戦略の推進に大きな期待を寄せており、オールジャパンでの創薬体制の構築は国策としても非常に重要な取り組みとなっている。このような背景の中、健康・医療戦略推進の中心的な役割を担う独立行政法人本医療研究開発機構の始動を間近に控え、非常に時期を得たタイミングで本講演会を開催することが出来た。講演会においては、産学官連携による



オールジャパン体制でのアカデミア創薬の取り組みについて、その最前線でご活躍されている先生方をお招きしご講演頂いた。

前半のセッションでは、大阪大学における産学連携体制構築の取り組みについての紹介と、実際の産学連携からの *in silico* 創薬成功事例の紹介を、土井 健史先生、並びに仲西 功先生からご報告頂いた。土井先生からは、産学連携を進めるための大阪大学の戦略、或いは大学現場での課題やその克服のための打ち手についてご紹介頂き、仲西先生からは、研究内容の紹介に加え、企業出身のアカデミアとして、産学連携に関する双方の役割についてご提言頂いた。

後半のセッションは核酸創薬及び抗体創薬の分野でオールジャパンでの創薬体制構築に取り組まれている小比賀 聡先生、並びに堤康央先生にご講演頂いた。お二人とも、それぞれの専門分野での国内におけるキーパーソンであり、医薬基盤研で始動した創薬支援スクリーニングセンターでの活動を始め、オールジャパンでの創薬体制構築に向けた精力的な取り組みについてご報告いただき、創薬にかける非常に熱い思いを共有させて頂くことが出来た。

最後のセッションでは、医薬基盤研究所創薬支援戦略室の取り組みのアップデートについて、有馬 賢治氏からご報告頂き、その後会場の参加者も交えた総合討論を行った。総合討論では、産学双方からお互いの理解を深めるため、活発な質疑応答が行われ、その後の懇親会においても引き続き活発な議論で盛り上がり、半日ではあったが大変有意義な講演会を終えることが出来た。



中村純二先生



土井健史先生



仲西功先生



小比賀聡先生



堤康央先生



有馬賢治先生

第 357 回 CBI 学会 講演会

「Special Population (人種、腎疾患、肝疾患、小児)における薬物動態の予測の現状と将来展望」

日時：2014 年 12 月 12 日 (金)13:15-18:10

場所：東京大学山上会館 2 階 大会議室 (東京都文京区本郷 7-3-1)

世話人：杉山 雄一 (理化学研究所イノベーション推進センター杉山特別研究室)、前田 和哉 (東京大学大学院薬学系研究科)

プログラム：

(1) 13:15-13:50 「Special population における薬物動態予測の現状 (総論)」

前田 和哉 (東京大学大学院薬学系研究科)

- (2) 13:50-14:20 「人種差の機序を理解するための速度論 ; スタチンを例にして」
富田 純子 (大日本住友製薬株式会社)
- (3) 14:20-15:00 「薬物動態・薬効・副作用の個人間変動を定量的に理解する」
杉山 雄一 (理化学研究所イノベーション推進センター杉山特別研究室)
- (4) 15:00-15:30 「薬物動態の人種差の予測」
井上 晋一 (第一三共株式会社)
- (5) 15:30-16:00 「小児における薬物動態の予測」
鈴木 美咲 (ファイザー株式会社)
- (6) 16:20-16:50 「肝疾患時の薬物動態の予測」
峯松 剛 (アステラス製薬株式会社)
- (6) 16:50-17:25 「腎疾患時における薬物動態の予測」
加藤 将夫 (金沢大学)
- (7) 17:25-18:00 「小児における投与」
永井 尚美 (医薬品医療機器総合機構)
- (8) 18:00-18:10 総合討論

開催報告 :

本 CBI 講演会においては、これまで様々なシチュエーションにおける薬物動態の定量的予測法について議論を深めてきたが、そのほとんどは、健常成人をベースに考えたものであった。しかし、実際に医薬品が投与されるのは、年齢・性別・体格・病態など様々な背景の患者であり、体内動態の予測に向けては、薬の特性に加えて、生体側のシステムパラメータの違いも考慮する必要がある。今回は、special population と呼ばれるサブグループ (例 : 人種、特定の疾患患者、小児、高齢者など) における薬物動態の把握の現状と予測への課題について、あらゆる立場からお話いただいた。本研究領域での重要な課題でありながら系統的なシンポジウムがあまり行われていないこともあり、当日は、109 名のご参加をいただくに至った。



最初に前田が、special population に関する体内動態研究と数理モデルを用いた臨床試験を介さない動態予測法に関する現状と課題についてオーバービューをした。次に、富田先生からは、OATP1B1 の基質薬物であるスタチン系薬物の体内動態の人種差のメカニズム解明と薬効・副作用の個人差予測への展望を講演していただいた。杉山先生からは、数理モデル解析に、さらに special population における体内動態の支配因子の機能変動および個人差のばらつきを定量的に考慮した上で、仮想的なヒトデータを発生させることで、薬物動態の平均値のみならず個人差の程度までを評価できる virtual clinical trial の取り組みについて紹介があった。井上先生からは、既存の薬物動態シミュレーションソフトである Simcyp を用いて日本人と白人の間の薬物動態の人種差を複数の薬物を



対象として解析した事例を紹介していただいた。また鈴木先生からは、小児における薬物動態において、必ずしも小児の最適な投与量は、成人の投与量を体重や体表面積で比例計算できるほど単純ではなく、生理学的パラメータの個々のダイナミックな変動を統合解析できる数理モデルの活用が重要である由が発表された。峯松先生は、肝疾患時の薬物動態の予測ということで、Child-Pugh 分類に基づく肝障害の重篤度に応じてモデルパラメータを変動させた PBPK モデルによる薬物動態予測の事例をお話いただいた。一方、加藤先生からは、腎疾患時にお

ける薬物動態を支配する要因（蛋白結合率、肝腎クリアランス等）の個々の変動についての現在の知見を整理していただくと共に、これらの変動について分子レベルで定量的な変動を明らかにすると共に、そのメカニズムの解析が今後必要であることを講演いただいた。最後に、官（PMDA）の立場から永井先生には、小児における医薬品開発、投与量設定、添付文書への反映の難しさ、それを克服するための組織内での取り組み、今後の課題についてまとめていただいた。以上、special population に対する薬物動態の予測・適切な投与設計の決定についての取り組みに関する最新の事情について、様々な観点から共有することができ、さらに今後、数理モデルを活用した定量的な動態・薬効予測のための技術革新・バリデーションなど克服すべき課題も明らかとなり、全体として非常に有意義な研究講演会となったと考えている。



前田和哉先生



富田純子先生



杉山雄一先生



井上晋一先生



鈴木美咲先生



峯松剛先生



加藤将夫先生



永井尚美先生

第 358 回 CBI 学会 講演会

「バイオ NMR 創薬活用への新展開」

日時：2015 年 1 月 14 日（水）13:20-17:40

場所：東京大学山上会館 2 階 大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：大元 和之（小野薬品工業株式会社）、谷村 隆次（東レ株式会社）、緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）

プログラム：

- (1) 13:20-13:30 はじめに
- (2) 13:30 -14:30 「創薬と NMR と計算科学」
高橋 栄夫（横浜市立大学）
- (3) 14:30-15:20 「エーザイの化合物探索現場における NMR 活用」
守谷 潤（エーザイ株式会社）
- (4) 15:40-16:40 「創薬における NMR スクリーニング手法の活用」
半沢 宏之（第一三共 RD ノバーレ株式会社）
- (5) 16:40-17:30 「NMR 情報を活用したインシリコ創薬の高精度化」
広川 貴次（産業技術総合研究所）
- (6) 17:30-17:40 おわりに

開催報告：

「バイオ NMR- 創薬活用への新展開」というテーマで講演会が開催された。具体的には、NMR によるタンパク質-低分子間相互作用解析に関する最新技術とその応用事例、実際の創薬現場における活用事例やより高精度な *in silico* 創薬への展開などについて話された。約 120 名の参加者のうち、8 割以上が企業関係者ということで、創薬の現場における NMR のより一層の活用に対する期待度の高さが窺われた。

「創薬と NMR と計算科学」高橋 栄夫先生（横浜市立大学）

創薬研究において NMR 法を活用するには、時間をかけて標的タンパク質-低分子複合体の立体構造を決定するより、分子間の各相互作用を迅速に検出し、キャラクターゼーションするアプローチが重要視される (Jahnke, J. *Biomol. NMR*, 39, 87 (2007))。リガンド分子の NMR シグナル検出を基盤とするスクリーニング手法やリガンドエピトープ (ファーマコフォア) マッピング技術など、創薬研究への活用を意識した NMR 相互作用技術や NMR と計算科学を融合した研究アプローチの実例についてご紹介いただいた。



高橋栄夫先生

「エーザイの化合物探索現場における NMR 活用」守谷 潤先生（エーザイ株式会社）

複数の NMR による相互作用解析手法を、各創薬プロジェクトの状況に応じて使い分けた事例や同社が発見した新規タンパク質間相互作用阻害剤の作用メカニズムを NMR と計算科学的手法を組み合わせた立体構造解析によって明らかにした事例についてお話しいただいた。標的タンパク質-低分子複合体の部分的立体構造情報を得るための NMR 手法である INPHARMA 法や DIRECTION 法と分子動力学計算などの計算科学的手法を組み合わせることで、信頼性の高い複合体構造モデルを得て、リガンド設計に活用した事例が紹介された。



守谷潤先生

「創薬における NMR スクリーニング手法の活用」半沢 宏之先生

(第一三共 RD ノバーレ株式会社)

近年になって製薬会社では NMR はタンパク質と低分子化合物との相互作用を検出、解析するスクリーニング的な役割を果たすようになってきたが、同社では長年にわたりバイオ NMR の活用に取り組んできた。基礎的な内容に始まり、最近の話題、さらには社内での事例を踏まえて、創薬に役立つ実践的な NMR 技術を総合的にご紹介いただいた。



半沢宏之先生

「NMR 情報を活用したインシリコ創薬の高精度化」広川 貴次先生（産業技術総合研究所）

NMR のケミカルシフトの情報やスピラベルを用いた解析結果をインシリコ解析の拘束条件とすることで、False Positive が軽減され、インシリコ創薬を高精度化することが可能である。さらに、インシリコ解析から得られる 3 次元情報を NMR 研究者へフィードバックすることで NMR 解析の精度も上がる。このように、タンパク質-低分子間の相互作用やタンパク質間相互作用の解析において、NMR とインシリコ間の相互のやり取りが非常に有用であった事例をご紹介いただいた。



広川貴次先生



今後の講演会・研究会 予定

第 360 回 CBI 学会講演会

「Big Data と創薬」

日時：2015 年 3 月 12 日（木）13:15-17:55

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：上村 みどり（帝人ファーマ（株））、服部 一成（塩野義製薬（株））、
狩野 敦（（株）菱化システム）

第 361 回 CBI 学会講演会

「臨床情報の創薬 R & D における活用～

情報の集積・統合・解析～」

日時：2015 年 4 月 24 日（金）13:00-17:10

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル 北館タワー C 7 階

大阪イノベーションハブ（予定）（大阪市北区大深町 3-1）

世話人：山崎 一人（大日本住友製薬（株））、坂田 恒昭（大阪大学）、森 浩禎
（奈良科学技術先端大学）

個別化医療研究会・キックオフミーティング

日時：2015 年 5 月 15 日（金）13:00-17:10

場所：岐阜薬科大学 1 F 第一講義室

（岐阜県岐阜市大学西一丁目 25 番地 4）

主査：中村 光浩（岐阜薬科大学 実践薬学大講座 医薬品情報学 教授）

副主査：永澤 秀子（岐阜薬科大学 創薬化学大講座 薬化学研究室 教授）

第 363 回 CBI 学会講演会

「ドラッグ・リポジショニングの可能性」

日時：2015 年 5 月 28 日（木）13:15-17:45

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：中嶋 久士（興和株式会社）、嶋根 みゆき（中外製薬（株））、谷村 直樹
（みずほ情報総研（株））、佐藤 貴哉（（株）カモソフトウェアジャパン）

委員会報告

【創薬研究会運営委員会】

第 14 回創薬研究会運営委員会

日時：2014 年 11 月 11 日 (金) 10:00-12:00

場所：東京工業大学 田町 CIC 2 階 多目的室1 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者(敬称略)：石川 誠(日産化学工業)、小田 晃司(大正製薬)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦(菱化システム)、小長谷 明彦(東京工業大学)、嶋根 みゆき(中外製薬)、高土居 雅法(杏林製薬)、田上 宇乃(味の素)、多田 幸雄(東京大学)、谷村 直樹(みずほ情報総研)、中嶋 久士(興和)、新美 達也(アステラス製薬) 服部 一成(塩野義製薬)、松本 俊二(富士通)、緑川 淳(ワールドフュージョン)、塚田 優子(CBI 学会事務局)

欠席者(敬称略)：大元 和之(小野薬品工業)、江口 晃史(CTCLS)、岡部 隆義(東京大学)、上村 みどり(帝人ファーマ)、河合 隆利(エーザイ)、相良 武(大鵬薬品工業)、佐藤 貴哉(カモソフトウェアジャパン)、砂田 真志(田辺三菱製薬)、高岡 雄司(アクセルリス)、田中 博(東京医科歯科大学)、谷村 隆次(東レ)、本間 光貴(理研)、水間 俊(松山大学)、望月 祐志(立教大学)

議題：(1) 2014 年大会報告書(資料 1) 小長谷理事

① 来年度への課題

② 2015 年大会の概略説明

(2) アカデミアと CBI 法人会員企業とのマッチングについて 片倉主査

① アンケート実施予定

(3) 各講演会の企画進捗状況報告(資料 2)

(4) 今後の講演会企画についてグループ毎に討議

(5) その他

① 研究会について質疑応答

② CBI ジャーナルへの投稿依頼

資料：(1) 2014 年大会報告書

(2) 講演会予定一覧



第 15 回創薬研究会運営委員会

日時：2015 年 1 月 14 日 (水) 10:00-12:20

場所：東京大学 山上会館会議室 001 号室(東京都文京区本郷 7-3-1)

出席者(敬称略)：石川 誠(日産化学工業)、大元 和之(小野薬品工業)、小田 晃司(大正製薬)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦(菱化システム)、上村 みどり(帝人ファーマ)、小長谷 明彦(東京工業大学)、相良 武(大鵬薬品工業)、砂田 真志(田辺三菱製薬)、高土居 雅法(杏林製薬)、田上 宇乃(味の素)、多田 幸雄(東京大学)、谷村 直樹(みずほ情報総研)、谷村 隆次(東レ)、中嶋 久士(興和)、本間 光貴(理化学研究所)、松本 俊二(富士通)、緑川 淳(ワールドフュージョン)、塚田 優子(CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略) : 江口 晃史 (CTCLS)、岡部 隆義 (東京大学)、河合 隆利 (エーザイ)、嶋根 みゆき (中外製薬)、佐藤 貴哉 (カモソフトウェアジャパン)、高岡 雄司 (バイオピア)、田中 博 (東京医科歯科大学)、新美 達也 (アステラス製薬)、服部 一成 (塩野義製薬)、水間 俊 (松山大学)、望月 祐志 (立教大学)

議題: (1) 2015 年大会について (資料 1) 片倉主査
(2) アカデミアと CBI 法人会員企業とのマッチングについて討議
(3) 各講演会の企画進捗状況報告 (資料 2)
(4) グループ討議

資料: (1) 2015 年大会について
(2) 講演会予定一覧

【関西部会】

第 6 回関西部会運営委員会

日時: 2014 年 12 月 2 日 (火) 10:00-12:00

場所: (財) 都市活力研究所 会議室 (大阪市北区大深町 3 - 1 グランフロント大阪 タワー C 7F)

出席者 (敬称略): 小長谷 明彦 (東京工業大学)、木下 誉富 (大阪府立大学)、塩田 武司 (塩野義製薬)、水口 賢司 (医薬基盤研究所)、山崎 一人 (大日本住友製薬)、志水 隆一 (都市活力研究所)、森 一郎 (神戸大学)、森 浩禎 (奈良先端大学)、坂田 恒昭 (関西副部会長、塩野義製薬)、田中 成典 (関西部会長、神戸大学)、牛尾 (書記、神戸大学)

欠席者 (敬称略): 正城 敏博 (大阪大学)、早乙女 周子 (京都大学)、鶴田 宏樹 (神戸大学)、奥野 恭史 (京都大学)、田口 隆久 (産業技術総合研究所)

議題: (1) 4 月 24 日 (金) 次回 CBI 学会関西部会研究講演会 (グランフロント大阪イノベーションハブ) について:
(2) 次回 CBI 学会関西部会講演会の計画 (2015 年 11 月頃を予定)
(3) CBI2015 大会について (2015 年 10 月 28 日にメインホールで「アカデミア創薬」を企画)
(4) CBI 法人会員である関西企業への運営委員会参加の呼びかけ
(5) 今後の企画 (キーワード) について:ビッグデータの倫理面、HPC 利用、大規模ドッキングシミュレーションとカ場、細胞シミュレーション、毒性予測、メタゲノム、腸内細菌、インフォマティクス手法の活用など

【執行部会】

第 20 回執行部会

日時: 2014 年 11 月 19 日 (水) 18:00 - 20:00

場所: 東京工業大学 田町 CIC 506 号室 (東京都港区芝浦 3- 3- 6)

出席者 (敬称略): 田中 博 (東京医科歯科大学)、石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、岡部 隆義 (東京大学創薬オープンイノベーションセンター)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、河合 隆利 (エーザイ)、小長谷明彦、高岡 雄司 (アクセルリス)、多田 幸雄 (東京大学創薬オープンイノベーションセンター)、水間 俊 (松山大学)、小澤 陽子 (事務局)

欠席者 (敬称略): 田中 成典 (神戸大学)、本間 光貴 (理化学研究所)、望月 祐志 (立教大学)

議事: (1) 2014 年大会報告、反省、意見
(2) CBI ジャーナルの今後
(3) 2015 年大会 (プレナリー講師候補、フォーカストセッション申込要綱) について
(4) 岐阜地区の研究講演会の参加費について
(5) 予算について

- 資料: (1) CBI2014 年大会 収支(見込)
 (2) CBI2014 年大会 実行委員長の報告
 (3) CBI2014 年大会フォーカストセッション 参加人数一覧
 (4) CBI2014 年大会フォーカストセッション モデレーターの報告
 (5) CBI ジャーナル編集委員会議事録 (2014.10.28)
 (6) CBI2015 年大会組織とプログラム案
 (7) フォーカストセッション申込書(案)
 (8) 情報計算化学生物学会 予算(案)
 (9) その他報告

第 21 回執行部会

日時 平成 27 年 1 月 29 日(木) 18 時- 20 時

場所: 東京工業大学 田町 CIC 506 号室(東京都港区芝浦 3- 3- 6)

出席者(敬称略): 田中 博(東京医科歯科大学)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、小長谷 明彦(東京工業大学)、多田 幸雄(東京大学創薬オープンイノベーションセンター)、高岡 雄司(ダッソー・システムズ・バイオピア)、田中 成典(神戸大学)、本間 光貴(理化学研究所)、水間 俊(松山大学)、小澤 陽子(事務局)

欠席者(敬称略): 石川 智久(NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、岡部 隆義(東京大学創薬オープンイノベーションセンター)、河合 隆利(エーザイ)、望月 祐志(立教大学)

- 議事: (1) 総会議案策定
 (2) 2014 年度の収支
 (3) 新規研究会設立申請について
 (4) 評議員会メンバーの推薦
 (5) 執行部会メンバーの推薦
 (6) 2015 年大会進捗
 (7) CBI ジャーナルと学会誌の現状
 (8) 関西部会への法人会員参加の案内

- 資料: (1) 2014 年の収支(最終)
 (2) 2014 年大会収支報告
 (3) 2014 講演会参加者人数と収支
 (4) 個別化医療研究会 設立申込書
 (5) 総会資料(ドラフト)



【2015 年大会 拡大実行委員会】

第 2 回拡大実行委員会

日時: 2014 年 12 月 17 日(水) 14:00-16:00

場所: 東京工業大学 田町 CIC 2 階 多目的室1(東京都港区芝浦 3- 3- 6)

出席者(敬称略): 堀内 正(慶應義塾大学)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、坂田 恒昭(塩野義製薬/大阪大学)、田中博(東京医科歯科大学)、岡部 隆義(東京大学創薬オープンイノベーションセンター)、河合 隆利(エーザイ)、小長谷明彦(東京工業大学)、多田 幸雄(東京大学創薬オープンイノベーションセンター)、茂樺 薫(順天堂大学大学院医学研究科)、小澤 陽子(事務局)

欠席者(敬称略): 中西 淳(武田薬品工業)、石川 岳志(長崎大学)、石川 智久(NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、荻島 創一(東北大学東北メガバンク機構)、田中 成典(神戸大学)、高岡雄司(ダッソー・システムズ・バイオピア)、本間 光貴(理化学研究所)、水間 俊(松山大学)

- 議事：(1) 大会企画のプレナリー講師の依頼進捗状況
 (2) 大会企画の招待講演者について
 (3) 2015 年大会プログラム委員会メンバーについて
 (4) 収支見込みについて
 (5) プログラム枠の決定
 (6) 要旨の言語とテーマタイトルの英語表記について
 (7) 生命医薬情報学連合大会の開催について
 (8) 1階会場（企業展示、ポスター発表）のレイアウトについて
 (9) 次回の会合予定

- 資料 (1) 講師依頼進捗状況
 (2) 2015 年大会プログラム委員会メンバー（案）
 (3) 予算案
 (4) 2015 出展募集要綱（案）
 (5) プログラム枠（案）
 (6) 要旨の言語とテーマタイトルの英語表記について
 (7) 生命医薬情報学連合大会の開催について
 (8) 1階会場レイアウト（案）



【2015 年大会 プログラム委員会】

第 1 回プログラム委員会

日時：2015 年 1 月 16 日（金） 15:00 - 17:00

場所：東京工業大学 田町 CIC 501 号室（東京都港区芝浦 3- 3- 6）

出席（敬称略、分野順）：本間 光貴（理化学研究所）、片倉 晋一（第一三共 RD ノバーレ株式会社）、石川 岳志（長崎大学）、森 寛敏（お茶の水女子大学）、多田 幸雄（東京大学）、茂榎 薫（順天堂大学）、関嶋 政和（東京工業大学）、水間 俊（松山大学）、石川 智久（NPO 法人地方再興・個別化医療支援）、湯田 浩太郎（株式会社インシリコデータ）、小長谷 明彦（東京工業大学）、多田隈 尚史（京都大学）

欠席（敬称略、分野順）：平山 令明（東海大学）、高岡 雄司（ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社）、広川 貴次（産業技術総合研究所）、荻島 創一（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構）、水口 賢司（医薬基盤研究所）、石田 誠一（国立医薬品食品衛生研究所）

- 議事：(1) 片倉大会実行委員長より、委員会資料に沿って大会の概要の説明
 (2) フォーカストセッションについて
 (3) ポスター発表に関して
 (4) 次回プログラム委員会

- 資料：(1) 2015 年大会プログラム委員名簿
 (2) 大会開催概要
 (3) 大会プログラム枠
 (4) 講師・スポンサードセッション進捗状況
 (5) 2014 年大会 FS 一覧
 (6) FS 申込書
 (7) ポスター投稿募集要項案

CBI 学会誌 第 3 卷 第 1 号

2015 年 2 月 28 日 発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 高橋 まき 町田 規子

湯川 真澄 塩塚 真理 小宮山 直美

発行：CBI 学会

本著作物の著作権は著者にあり、CBI 学会は、本著作物に関する
冊子および電子媒体による複製、配布、改変、再出版の権利を持つ。

