

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第 5 卷第 2 号

2017 年 5 月 31 日発行

目次

(1) CBI 学会 会長退任の挨拶 田中 博 (東北大学 東北メディカル・メガバンク機構 / 東京医科歯科大学 名誉教授)	1
(2) CBI 学会 会長就任の挨拶 片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ株式会社)	2
(3) 2017 年大会フォーカストセッション等の準備状況 石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所、2017 年大会プログラム委員長)	3
(4) CBI ジャーナル便り (9)	4
(5) 講演会報告	6
(6) 第 4 回 個別化医療研究会報告	12
(7) 委員会報告	13



CBI 学会 会長退任の挨拶

東北大学 東北メディカル・メガバンク機構
東京医科歯科大学 名誉教授

田中 博

本年3月末をもって CBI 学会の学会長を退任するに当たり、ご挨拶を申し上げたいと思います。

私が CBI 学会長に就任しました 2011 年 4 月当時は、我が国においては東日本大震災があった年ですが、本 CBI 学会に於きましても大変な過渡期・動乱期でありました。これまで CBI 学会を創設し、その後も陰になり日向になり学会を主導して頂いた神沼先生が CBI 学会活動の中軸から引退されることとなり、CBI 学会のこれまでの学会長の先生を始めとして、現在 NPO 法人の理事長である小長谷先生、さらにこれまで学会を支えて来られた諸先生と、前年度から頻回に亘って集まり、本 CBI 学会の再体制化に向けて熱心に議論したことを覚えております。その結果、翌年には NPO 法人 CBI 学会が立ち上がり、現在の CBI 学会体制が順次確立して行きました。

本 CBI 学会およびその前身（2000 年以前）の CBI 研究会は、かつてから「インシリコ創薬」を中心的な学術活動とする学術団体として広く認識されています。当時の学会長としての私に期待された役割は、これに加え、シーケンス革命などによって急速に進展していた「ゲノム・オミックス医療・創薬」に関して、特に医学系の研究者の本学会へ参加を促進し、学会のサブ領域として拡充を図るということでした。その一環として日本バイオインフォマティクス学会や日本オミックス医療学会への合同大会開催に本学会が積極的に関わっていた時期もありましたが、「学会エコシステム」の諸限界もあり、学会長としての 6 年を鑑みましてこの方面での活動が十分達成できなかったことは心残りです。

ただ、「インシリコ創薬」は、ますます「ビッグデータ」や「人工知能」時代を向え、基盤的な理論・技術として重要性を増加しています。無闇に周辺分野との「拡張・包摂化」を図るより、「インシリコ創薬」の学会としての「深化と代表性」を明確にし、その強靱な基盤の上に周辺関連分野へと積極的に関与する方向こそが一本学会の進むべき途と思います。

私がある東北大学メディカル・メガバンクのグループは、実名のコホート情報基盤システムや匿名化後の統合データベースの構築・運営、そのインテリジェント化に従事しています。また東京医科歯科大のグループは、近年、「網羅的分子プロファイル情報を基礎にした AI 創薬・DR」の研究に取り組んで、現在私も「AI 創薬」の単行本の執筆に追われています。学会長時代はあまり創薬研究に関与していませんでしたが、学会長退任後は、いろいろな部面で CBI 学会にご協力・貢献することが出来そうです。

CBI 学会の皆様方の今後の活躍と学会のさらなる発展を祈願して、簡単ですが退任の挨拶としたいと思います。

平成 29 年 3 月 吉日



CBI 学会 会長就任の挨拶

第一三共 RD ノバーレ株式会社

片倉晋一



この度、田中博前会長の後任として CBI 学会会長を拝命いたしました片倉晋一でございます。会長就任にあたり、ご挨拶させていただきたいと思っております。

私は 2011 年より CBI 学会創薬研究会の主査として CBI 学会活動、特に研究講演会の企画に関わらせていただきました。CBI 学会では製薬企業、IT 企業からなる法人会員の幹事の方が集まり各回の研究講演会のトピックについて情報交換・議論をしながら決めていきます。近年の研究講演会は毎回非常に盛況で、参加者が定員を超える講演会も少なくありません。このことは企画側の興味や問題提起が多くの創薬研究に携わる研究者の方々の共感を得ている証であり、最先端の情報をタイミングよく提供する貴重な研究会であることを示しています。この活動を通して私自身、CBI 学会の意義、そして素晴らしさを改めて理解できたと思っています。

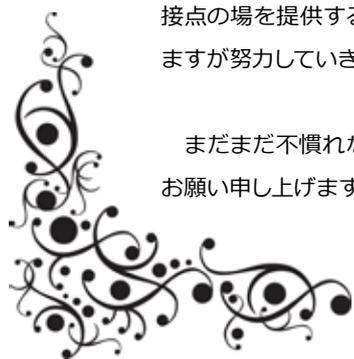
CBI 学会はケモインフォマティクス、バイオインフォマティクスからスタートし、現在は計算化学を基盤として幅広く様々な学問領域を取り扱うようになっており、特に創薬の点から *in silico* 創薬に焦点をあてています。製薬企業、IT 企業から参加する幹事が企画し、アカデミアの先生方をお招きし最新の情報を講演いただき、意見交換、ネットワークを広げる、研究講演会に代表されるこのような活動は CBI 学会のアクティビティを象徴するものです。一方、年次大会はアカデミアの先生方が中心となって企画を行っており、萌芽的な研究をサポートするよう非常に多くのフォーカストセッションを開催しています。年次大会も年々、参加者が増え、大規模な大会となってまいりました。年次大会には製薬企業、IT 企業の参加者が多く、年次大会もアカデミアと企業との接点として毎年様々なテーマに関して議論する場を提供しています。

近年の創薬研究では様々な最新技術、最新研究を取り入れた総合科学的な取り組みが必須であり、製薬企業だけで賄いきれるわけではなく、オープンイノベーションなしでは成り立たなくなっています。そのような多種多様な研究から生み出されるデータは増え続ける一方であり、CBI 学会の基盤であるケモインフォマティクス、バイオインフォマティクスの重要性は言うまでもありません。また、昨今の AI ブームに対する大きな期待も必然であるといえます。このような状況下、CBI 学会が研究者の皆様にとって益々価値ある学会になるものと確信しております。

日々うまれる新しい技術に関わる研究現場の研究者と新たな解析手法を考えその応用を模索する研究者との接点の場を提供する学会、CBI 学会がそのような学会であり続けるよう、皆様のご協力のもと、微力ではありますが努力していきたいと思っております。

まだまだ不慣れなこともあり、ご不便をお掛けすることが多々あるかと思っておりますが、今後とも何卒よろしくご協力をお願いします。

平成 29 年 4 月 吉日



2017 年大会フォーカストセッション等の準備状況

2017 年大会 プログラム委員長

石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)

CBI 学会 2017 年大会のプログラム委員長を務めさせていただくことになりました、国立衛研の石田です。よろしくお願い致します。CBI 学会 2017 年大会のプログラム委員会も 2 回の開催を終え、産業技術総合研究所の堀本先生(大会長)、広川先生(実行委員長)と連携し、フォーカストセッション、ポスターセッションの企画も順調に進んでおります。フォーカストセッション、ポスターセッションでは、従来と同様に、CBI 学会にある 5 つの分野を中心に幅広い企画を準備しております。

フォーカストセッションは、すでにプログラム企画委員からの提案を中心に、計算毒性学の基礎からインシリコ創薬まで幅広い内容のセッションが企画されております。CBI 学会となじみの深いテーマだけではなく、ゼブラフィッシュを中心としたモデル生物研究や腸内細菌叢というこれからの創薬に重要となる新たな分野についても扱っております。フォーカストセッション本来の趣旨である、“異分野の研究者が集まり、現状の問題点や今後の方向性を密に議論する場”を提供できるように準備を進めて参ります。なお、以前メールで配信しましたように、現在 CBI 会員向けにフォーカストセッションの企画を募集しております。特に、若い会員の方が自らの新しいアイデアについて議論を戦わすようなご提案も歓迎ですので、是非企画の検討をお願いいたします。

ポスターセッションに関しては、すでに投稿の受付は開始されております。今大会でも、各分野のフォーカストセッションと連携し、口頭発表の場を用意しました。口頭発表は若手研究者が積極的に研究成果を発信できる場を作り、分野全体を盛り上げる機会にしたいと考えております。選択制となっておりますので、是非、ポスター発表に加え、口頭発表の機会もご検討いただければ幸いです。投稿は、例年より早めですが、7 月 31 日 (月) まで受け付けております。奮って投稿いただきますようお願い申し上げます。

併せまして、本大会においては、公開シンポジウムとして「分子ロボティクスシンポジウム」、「FMODD・KBDD 合同公開シンポジウム」、また、市民公開講座として「心と体の健康」を企画しております。フォーカストセッションから公開シンポジウム、市民講座まで多岐の分野にわたっておりますが、守備範囲の広い CBI 学会ならではの大会となるよう努めてまいります。皆様の積極的なご参加をお待ちしております。

CBI ジャーナル便り (9)



◆ シミュレーションのみの論文も積極的に受理しております

CBI ジャーナルは「分子認識と分子計算」「インシリコ創薬」「バイオインフォマティクスとその医学応用」「医薬品研究と ADMET」「上記に属さない先進的研究」の5分野で、Original、Review、Communication、Opinion 論文の投稿を募っております。ジャーナルへの特徴として、シミュレーションのみの論文も積極的に受理しております。新たなアイデアや問題などについてできる限り早く報告し、研究の新規性と独創性を主張するポジションペーパーとしても CBI ジャーナルをご活用下さい。現在、CBI 学会会員の投稿料(基本料金、ページ単価)は無料です。

◆ CBI 学会関連分野の意見論文を募っております

西尾元宏先生(CHPI 研究所)から、CBI 学会誌第3巻1号(2015年)に掲載されました提言論文私の意見: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」をCBI ジャーナルの意見論文として投稿頂きました。

今後、このような意見論文を各分野のから投稿して頂けることを期待致しております。

◆ 論文受付から掲載までの期間短縮への対応

博士論文等、早急に論文掲載を要望される場合にはCBI ジャーナル事務局(editor@cbi-society.org)までご連絡下さい。これまでに、論文受付から掲載まで1か月で対応した事例があります。

◆ 速報 CBI ジャーナル新掲載論文

<Original>

「分子動力学計算を用いたトルテロジンの CYP3A4 代謝部位予測」

佐藤 敦子^{1,2}、幸 瞳³、渡邊 千鶴³、齋藤 純一¹、小長谷 明彦²、本間 光貴^{2,3}

¹協和発酵キリン株式会社、²東京工業大学、³理化学研究所

要旨: CYP 群により薬物が代謝されることによる薬効の減弱、薬物間相互作用は創薬研究における重要な課題であり、中でも CYP3A4 は医薬品代謝への寄与が最も大きい。代謝不安定性の改善に対しては、一般的に脂溶性の低減や代謝部位の変換などが行われるが、求める薬効との両立が難しく、また代謝部位や結合様式を実験的に決定するには大きな労力が必要となる。そのため創薬現場では、薬効を維持しながら代謝を回避し得る効率的な薬物設計と、予測による低コスト化が求められている。CYP3A4 は様々な化学構造をもつ化合物を代謝することから、結合ポケットは非常に大きく、その形状も柔軟に変化し、化合物との結合様式予測は非常に難しい。我々はカルバマゼピン (CBZ) を題材とした先行研究において、ドッキング計算から得た複数の結合ポーズを初期構造とした分子動力学 (MD) 計算を組み合わせた代謝部位予測方法を検討した。本手法では、化合物と CYP3A4 との結合自由エネルギー値と、化合物の各炭素原子のヘム鉄への近づきやすさから、代謝部位を予測している。

さらに、この手法がより柔軟な構造を有する化合物にも適用可能か確かめることを目的とし、トルテロジンを題材とした代謝部位予測を試みた。この研究では、化合物ドッキングポーズからの MD 初期構造選択の際に Protein Ligand Interaction Fingerprint (PLIF) と RMSD の 2 種類のクラスタリング手法を用い、効率的な初期構造選択方法と予測結合様式からの代謝安定化デザインについて議論する。

<Communication>

「WNK キナーゼ特異的阻害剤の新規リード化合物探索のためのドッキングシミュレーション」

齊藤 奈英¹、多田 幸雄²、岡部 隆義¹、長野 哲雄¹

¹ 東京大学創薬機構、² 東京工業大学

要旨：偽性低アルドステロン II 型は、WNK1 [with no K (lysine) protein kinase-1] あるいは WNK4 に起因する非常に稀な常染色体優性遺伝疾患として知られている。これらのセリン-スレオニンキナーゼは、ATP 結合サイトのすぐ後ろにバックポケットがあるという特徴的な構造をしている。さらに、グリシンリッチループにあるリジン残基 (WNK1 の Lys233) は、活性に重要な役割を果たしていることも知られている。本研究において、我々は、WNK 特異的阻害剤を創成するためのリード候補化合物を探索するため、WNK1 のバックポケットと約 9000 化合物のフラグメントライブラリーとのドッキングシミュレーションを実施した。我々は、結合スコアに基づいてバックポケットと相互作用してヒンジ領域とは相互作用しないリード構造として、β-テトラロン (化合物 5) を選択した。次に、バックポケットとロ-テトラロンとの予測できる 4 つのドッキングパターンに基づいて、Lys233 と水素結合を形成することが予測される 4 つの誘導体化合物 A-D をデザインした。これらの誘導体化合物は、ドッキングシミュレーションにおいて Lys233 と選択的に相互作用することが示され、選択的な WNK 阻害剤を開発するための潜在的リード化合物であると考えられる。

<Opinion>

「水素結合神話」

西尾 元宏 CHPI 研究所

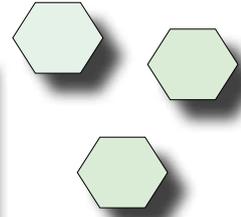
要旨：水素結合にまつわるステレオタイプの思考様式を「神話」として捉え、その弊害を、タンパク質の 3D 構造形成 (フォールディング) とタンパク質/特異的リガンド間の相互作用を例にとりて説明した。ほとんどの科学者は「水素結合が水中では殆ど機能しない」ことを忘れている。溶媒の水がタンパク質の水素結合形成に干渉するからである。この「神話」が論理的な薬物設計 (SBDD) を妨げる大きな要因となっていることを多くの事例を挙げて解説した。



CBI ジャーナル編集委員会

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>

講演会記録



第 380 回 CBI 学会 講演会

「AI 創薬の可能性：自然言語処理技術の現状と課題」

日時：2017 年 2 月 3 日（金）13:30-17:55

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 9 階 VisLab OSAKA (大阪市北区大深町 3-1)

世話人：森 浩禎 (奈良先端科学技術大学院大学)、小長谷 明彦 (東京工業大学)

プログラム：

- (1) 13:30-14:25 「スーパーコンピュータと人工知能で加速する臨床シーケンス研究」
山口 類 (東京大学・医科学研究所)
- (2) 14:25-15:20 「自然言語処理による科学技術論文からの知識獲得」
松本 裕治 (奈良先端科学技術大学院大学・情報科学研究科)
- (3) 15:35-16:30 「創薬オントロジーの現状と課題」
高井 貴子 (東北大学・東北メディカル・メガバンク機構)
- (4) 16:30-17:55 パネル討論
山口 類 (東京大学・医科学研究所)
松本 裕治 (奈良先端科学技術大学院大学)
高井 貴子 (東北大学・東北メディカル・メガバンク機構)
六嶋 正知 (塩野義製薬)
山崎 一人 (大日本住友製薬)

開催報告：

AI 創薬の可能性：自然言語処理技術の現状と課題」と題し、膨大な過去の知見、急激に蓄積が加速しているデジタル化された種々のデータベースを如何に創薬に活用できるか、を目的とした研究会を企画した。

まず、すでに始まっている膨大なゲノム情報を活用した医療への応用現場の最前線状を、東京大学・医科学研究所の山口准教授にご紹介をいただいた。実際にガン患者と正常人との発現情報の違い、ゲノム配列の SNPs など膨大な情報をスーパーコンピュータによる解析を駆使し、特定のガンにおける治療のターゲット分子の探索に活用し実際の治療に活かす取り組みの現状を紹介して頂いた。

ついで、ゲノム情報の違いに意味付けを行うために必須の生物学的情報の抽出・整理についてご講演を 2 題お願いした。アメリカ NCBI の PubMed に代表される膨大な文献情報は、人によって書かれた自然言語で記述されている。その為、そこから知識を自動で抽出することはすぐには実現できず、自然言語処理などの情報処理技術が必須である。一方、如何に情報を体系的に整理し、知識抽出を確実かつ容易にできるかという方向から、オントロジーによる情報の体系化も進んでいる。オントロジーとは、もともと哲学において





存在論として定義される体系で、情報科学やバイオインフォマティクス分野において多様な情報の概念化に向けた仕様として定着している。これら情報科学分野における基盤開発・整備を背景に、知識抽出・獲得から創薬へ発展させるため、膨大な文献情報、WEBから利用可能なデータベース情報、電子カルテ情報など、多様な情報源からいかにして有用な知識を抽出するかが課題である。

これに対し自然言語処理の第一人者である松本祐治教授（奈良先端大）とオントロジーのバイオ分野への活用を実践しておられる高井貴子准教授（東北大・メガバンク）をお招きしてご講演を頂いた。松本祐治教授からは、自然言語処理のこれまでの研究・開発状況、実データからの知識抽出に向けた問題点と可能性をご紹介いただいた。高井博士からは、オントロジー理論の解説と、実際の生命情報への適用についての解説をいただいた。両講演に対しての参加者からの質疑応答を通じて、参加者の理解が進んだ。

パネルディスカッションは、自然言語処理技術の創薬現場への応用可能性についてニーズ・シーズの双方から現状と課題についての議論を目的とした。講演者に加えて創薬の現場に携わっている製薬会社の研究員にも参加を依頼した。創薬現場からのニーズを発端とした意見から積極的な議論に発展し、AIによる学習を駆使した IBM・Watson のシステムに関する議論に発展した。日本の一企業で可能かどうかは別にして、人種によるゲノム情報や表現型の違いも含め、日本版 Watson のようなシステムの必要性を感じる議論であった。



山口類先生



松本裕治先生



高井貴子先生

第 381 回 CBI 学会 講演会

「難解析性タンパク質の構造解析手法の新展開」

日時：2017 年 2 月 16 日（木）13:30-17:45

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：岡田 興昌（田辺三菱製薬株式会社）、松本 俊二（富士通株式会社）、谷村 隆次（東レ株式会社）

プログラム：

- (1) 13:30-14:30 「多剤排出トランスポーター複合体の動的な構造解析」
村上 聡（東京工業大学）
- (2) 14:20-15:30 「プロスタグランジン受容体を中心としたシグナル選択的な制御を目指して」
小林 拓也（京都大学）
- (3) 15:45-16:45 「XFEL の創薬利用を目指したタンパク質 - リガンド複合体の連続フェムト秒結晶構造解析」
国島 直樹（理化学研究所）
- (4) 16:45-17:45 「コヒーレント X 線の散乱を用いた非晶性試料の構造解析」
篠原 佑也（東京大学）

開催報告：

2017年2月16日、東大山上会館にて開催した第381回CBI学会講演会「難解析性タンパク質の構造解析手法の新展開」について報告いたします。

医薬品のターゲットとなることが多い膜タンパク質やタンパク質複合体等の構造解析が難しい、いわゆる難解析性タンパク質に関し、近年の解析技術の進歩により、GPCR、イオンチャネルをはじめとして、その構造解析が次々と実現され、創薬に応用されつつあります。しかしながら、解析が困難な難解析性タンパク質はまだ多数存在しており、また、近年、解析できるようになったGPCR等でも、より短期間かつ確実に解析できる手法の開発が望まれています。そこで、こうした背景を基に今回「難解析性タンパク質の構造解析手法の新展開」というテーマで、最近注目を集めているX線自由電子レーザー(XFEL)やクライオ電子顕微鏡等の最新の測定手法も含め、難解析性タンパク質の構造解析技術の最新動向とその応用例について、4名の先生方にご講演いただきました。参加者は講師と世話人を含め74名を数え、本解析手法への関心の深さがうかがえました。



講演会では、まず、東京工業大学の村上聡先生に本講演会の主題である「難解析性タンパク質の構造解析手法」の現状について俯瞰していただくとともに、先生ご自身の研究成果である多剤排出トランスポーターの結晶構造解析に関して、X線結晶構造解析に加え、クライオ電顕解析による複合体の構造解析、さらには分子動力学シミュレーションによる動的解析をも活用して解明したトランスポーターの薬剤排出メカニズムについて、ご紹介いただきました。



村上聡先生



小林拓也先生



国島直樹先生



篠原佑也先生

次に、京都大学の小林拓也先生に、立体構造認識抗体を用いた膜タンパク質の高分解能X線結晶構造解析技術について、プロスタグランジン受容体を中心とした最新の構造解析結果をご紹介いただきました。GPCRのシグナル伝達を選択的に制御する抗体を用いることにより、シグナル選択的な制御の分子メカニズムの理解を通じて、副作用分離した医薬開発につながると期待されるお話でした。

続いて、理化学研究所の国島直樹先生に、タンパク質-リガンド複合体の連続フェムト秒結晶構造解析(SFX)について、2012年より供用開始となったX線自由電子レーザー(XFEL)施設SACLAにおける常温微結晶を用いたSFXによる解析結果を、同一蛋白質を対象にした従来のクライオ条件で測定したX線結晶構造解析結果と比較しながら、ご紹介いただき、SFXの特徴とその創薬利用の展望について、お話しいただきました。

最後に、東京大学の篠原佑也先生に、高輝度なコヒーレントX線を用いた非晶性試料の構造解析手法について、タンパク質に限らず広く非晶性試料の解析原理から解析の現状について、お話しいただきました。近年、高輝度放射光やXFELの登場により、従来の非晶性試料の散乱実験では得られなかった構造情報が得られるようになってきており、まだ、非晶タンパク質の立体構造決定までには、多くの課題があるものの、その実現へ向けて、着々と技術が進歩していることをご紹介いただきました。

4名の先生方のご講演により、難解析性タンパク質の構造解析手法に関する最新の研究状況と課題が整理されると共に、将来展望も見えたことから、この分野の研究者のみならず企業の創薬研究者にとって非常に意義深い会となりました。本会で示された最新の解析手法が一層発展し、難解析性タンパク質の構造解析がより身近なものとなつて、創薬への応用がさらに進化する事が期待されます。

第 382 回 CBI 学会 講演会

「人工知能と創薬－創薬現場で備えておくべきこと－」

日時：2017年3月2日（木）13:20-17:45

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：相良 武（大鵬薬品工業）、緑川 淳（ワールドフュージョン）、嶋田 朋嘉（帝人ファーマ株式会社）

プログラム：

- (1) 13:20-13:30 はじめに
- (2) 13:30-14:15 「コンパクトなデータ表現による高速な類似基質結合部位検索」
富井 健太郎（産業技術総合研究所 人工知能研究センター）
- (3) 14:15-15:00 「がんの Omics 解析と Deep Learning を使った画像解析の接点とその可能性」
辻 真吾（東京大学 先端科学技術研究センター）
- (4) 15:00-15:45 「深層学習の進展と Preferred Networks の取り組み」
大野 健太（株式会社 Preferred Networks）
- (5) 16:00-16:45 「人工知能技術の最新動向と製薬分野への応用」
木戸 邦彦（株式会社日立製作所）
- (6) 16:45-17:30 「創薬・医療応用を目指す産学連携 AI コンソーシアム」
奥野 恭史（京都大学大学院 医学研究科）
- (7) 17:30-17:45 総括

開催報告：

「ビッグデータ」や「人工知能」を最大限活用した創薬について、昨今、医薬業界のみならず、国を挙げての積極的な議論・取り組みがなされ、大きな注目を集めている。しかしながら、創薬における人工知能の活用には多くの課題が残されており、特に入力データの質や量、表現手法などが成否を左右することが想定されている。創薬研究の現場に必ず訪れるであろう人工知能の実戦投入に備えて、今、何を準備しておくべきかを議論することを目的とし、本講演会を企画した。当日は人工知能の創薬への活用に日々取り組まれている第一線の先生方をお招きし、最新の状況、現状の課題や今後の計画に関しご講演いただいた。100 を超える大学、研究機関、製薬企業から 140 名以上の参加者が集まり、創薬関係者の関心を裏付ける盛況な会となった。

はじめに産業技術総合研究所の富井健太郎先生より、PDB 登録されたタンパク質の基質結合部位の網羅的比較結果を収載したデータベース (PoSSuM) 並びにドラッグリポジショニングや副作用予測など利用することを目的とした (PoSSuMds) をご紹介いただいた。タンパク表面情報の粗視化と探索手法の改良により、高速にて 100 万を超える基質結合部位の比較が可能となり、本手法を用いることで、生体内での役割がわからなかったタンパク質の機能推定も可能とのこと（別のグループから実験検証データも紹介）。現在は人工知能を取り入れた解析も検討中とのこと、日々増大するタンパク構造データから創薬標的となりうる結合部位候補が提案されてくる可能性もあり期待される。



次に東京大学の辻真吾先生よりがんの Omics 解析と Deep Learning を使った画像解析の接点とその可能性についてご紹介いただいた。「Dry とか Wet とか言っている場合じゃない！」との冒頭のお言葉に象徴されるように、ビッグデータ解析に取り組み始める研究者として、データを効果的に解析するためのご苦労や多くの斬新な工夫についてご紹介され、特にデータ収集、欠損値の取扱いなど前処理段階の重要性を改めて強調された。マルチオミクスデータをヒルベルト曲線により画像化し、学習データとして利用されるなど非常に興味深いご講演となった。

次に、Preferred Networks の大野健太先生より深層学習の進展と同社における AI 技術活用の取り組みについてご紹介いただいた。めまぐるしく発展する機械学習・深層学習の最新情報のご紹介に続いて、同社が国立がんセンター・産業技術総合研究所と開始した CREST 「人工知能を活用した統合的がん医療システム開発プロジェクト」についての事例紹介があり、ヘルスケア分野における特徴的な課題として、新 NP 問題、解釈可能性、不均衡データの取り扱い、マルチモーダル性およびチューニングの難しさを挙げられた。患者データ数を増やすための戦略などについて会場を巻き込んだ熱い議論が展開した。



富井健太郎先生



辻真吾先生



大野健太先生



木戸邦彦先生



奥野恭史先生

引き続き、日立製作所の木戸邦彦先生からは、同社における人工知能技術の製薬分野への応用と、北米での医療分野での事例紹介（院内トリアージ、マイクロアレイデータ解析、抗がん剤の有害事象分析、ディベート型 AI）をご紹介いただいた。一般的な技術課題として、データ数が少ないこと、内部がブラックボックスとなること、パラメータ調整が難しいことを挙げられた。データ取得コストが他分野に比べて圧倒的に高いといわれる創薬製薬分野においては、異業種協創の重要性や同社における推進体制についても述べられた。

最後に、京都大学の奥野恭史先生より、IT 系企業と製薬・化学・医療・ヘルスケア関連企業 60 数社 200 名を越す参加者からなる AI コンソーシアム（ライフインテリジェンスコンソーシアム：LINC）について、設立のコンセプトから現状までをご紹介いただいた。産官学の協働体制および異業種協創が求められる本分野において、中核を担うコンソーシアムとなるのみでなく、データサイエンティスト不足が懸念される中、LINC を通じ創薬と IT・AI 分野の双方をつなげるデータサイエンティストの育成も期待される。日本の IT 業界は委託型の業務を受ける傾向があるが、より主導的な協力体制が必要であるとのこと。

どの講演においても、先生方の熱のこもった御講演に続いて質疑応答も途切れることがなく、講演会終了後の懇親会にも 50 名近くの方が参加され大盛況のうちに会が終了した。



今後の講演会 予定

第 385 回 CBI 学会講演会

「PK/PD-ADME-DDI サイエンスの最近の進歩

～ Quantitative Systems Pharmacology (QSP) との連結～」

日時：2017 年 6 月 9 日（金）10:00-17:40

場所：東京大学医学部総合中央館 医学図書館 333 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）、前田 和哉（東京大学大学院薬学系研究科）

第 386 回 CBI 学会講演会

「創薬を支援する構造データベースの応用」

日時：2016 年 7 月 21 日（金）13:10-17:45

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 1 階 国際会議室（東京都港区芝浦 3-3-6）

世話人：新美 達也（アステラス製薬）、徳良 誠健（大正製薬株式会社）、狩野 敦（モルシス）

第 387 回 CBI 学会講演会

「薬物 - 標的親和性計算の新潮流 ～古典 MD から量子 MD へ～」

日時：2017 年 9 月 1 日（金）13:00-17:50

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル（大阪市北区大深町 3-1）

世話人：木下 誉富（大阪府立大学）、山崎 一人（大日本住友製薬株式会社）、田中 成典（神戸大学）

第 388 回 CBI 学会講演会

「腸内細菌」(仮)

日時：2017 年 11 月 10 日（金）

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 1 階 国際会議室（東京都港区芝浦 3-3-6）



◆◆ 第 4 回 個別化医療研究会 ◆◆

日時：2016 年 11 月 25 日（金）13:00-17:10

場所：岐阜薬科大学 第一講義室（岐阜県岐阜市大学西一丁目 25 番地 4）

後援：日本薬学会東海支部、（一社）岐阜県薬剤師会、岐阜県病院薬剤師会

世話人：中村 光浩（岐阜薬科大学）、永澤 秀子（岐阜薬科大学）、紀ノ定 保臣（岐阜大学）

プログラム：

- (1) 13:00-13:05 開会挨拶 稲垣 隆司（岐阜薬科大学 学長）
- (2) 13:10-14:00 「患者アドヒアランス向上を目指した臨床現場での個別化医療への試み」
内田 信也（静岡県立大学薬学部 実践薬学分野 准教授）
- (3) 14:00-14:50 「治療効果を個別に評価する IT 技術の開発－敗血症モニタと三次元運動機能評価－」
松丸 直樹（岐阜薬科大学 グローバル・レギュラトリー・サイエンス寄附講座 助教）
- (4) 15:00-15:50 「MID3 (Model-Informed Drug Discovery & Development) と個別化」
鈴木 昭之（ファイザー株式会社 クリニカル・
ファーマコロジー部ファーマコメトリクスグループ）
- (5) 15:50-16:40 「重篤副作用の発症と関連するゲノムバイオマーカー」
中村 亮介（国立医薬品食品衛生研究所 医薬安全科学部 室長）
- (6) 16:40-17:10 総合討論

開催報告：

個別化医療では、患者の遺伝的背景、生理的状态、疾患などを考慮し、患者個々に対して治療の最適化が行われる。特にゲノム薬理学（PGx）の研究成果は、製薬企業はにおいて、医薬品の適切な使用や新薬開発プロセスの効率化に利用され、臨床現場の様々な段階に変化をもたらすことが予想されます。本研究会は、狭義の情報計算化学生物学の枠にとらわれず、「個の医療（個別化医療）」をテーマとして開催し、各分野の方々のご参加を頂いております。昨年 2015 年のキックオフミーティングから、今回で第 4 回目となります。

今回は、臨床、アカデミア、企業、および行政の各分野から 4 名の講師の先生をお招きいたしました。最初の演者の内田信也先生から、病院での豊富な臨床経験を踏まえ個別化医療の実際について、マイクロタブレットなどの最新の製剤に関する知見を交えてご講演頂きました。次いで、松丸直樹先生から心電図のリアルタイムデータから見いだされた新しい敗血症の評価基準など、治療効果を個別に評価できる先進的な IT 技術の取り組みをご紹介頂きました。鈴木昭之先生からは、医薬品開発における個別化医療の動向、製薬企業の立場から、医薬品開発の定量的意思決定に有用な MID3 についてご紹介頂きました。最後に中村亮介先生から患者の治療の最適化に役立つ、重篤副作用の発症と関連するゲノムバイオマーカーについて SJS と TEN を中心に最新の知見をご講演頂きました。総合討論では、会場からも多くの議論・提案がなされました。

今回の研究会には、講師を含め 42 名の参加を得ることができました。ご協力頂きました皆様方、および参加頂いた方々に感謝申し上げます。

（文責 中村 光浩）

委員会報告

【特定非営利活動法人 情報計算化学生物学会 総会】

第 9 回特定非営利活動法人情報計算化学生物学会総会

日時：2017 年 3 月 17 日 (金) 18:10-18:45

場所：A P 西新宿 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 5F F 会議室)

出席者数等 出席者 8 名、正会員総数 15 名

審議事項：第 1 号議案 2016 年度活動報告

第 2 号議案 2016 年度決算報告・監査報告

第 3 号議案 2017 年度活動計画

第 4 号議案 2017 年度予算

第 5 号議案 2017 年度役員名簿の報告

【特定非営利活動法人 情報計算化学生物学会 理事会】

第 11 回特定非営利活動法人情報計算化学生物学会理事会

日時：2017 年 3 月 17 日 (金) 18:45-18:55

場所：A P 西新宿 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 5F F 会議室)

出席者：理事総数 7 名 うち出席者数 4 名

審議事項：・議長選任の件

・議事録署名人の選出の件

・第 1 号議案 理事の選任の件

・第 2 号議案 理事長の選定の件

【執行部会】

第 28 回執行部会

日時：2017 年 2 月 17 日 (金) 11:40-12:40

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 506 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、岡部 隆義 (東京大学創薬機構)、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 (東京工業大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、多田 幸雄 (東京工業大学)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、福澤 薫 (日本大学)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学、Skype)、小澤 陽子 (事務局)

欠席者 (敬称略)：田中 成典 (神戸大学)、田中 博 (東北メディカルメガバンク機構/東京医科歯科大学)

議題：(1) 報告事項

1. 創薬研究会運営委員会報告
2. 法人会員登録者と講演会参加状況の作成と配布について
3. 関西・講演会参加者数と収支報告

4. 「秋の学校」協賛について
5. 「日本コンピュータ化学会 2017 春季年会」協賛について
6. 海外在住者の個人会費決済について
- (2) 総会議案策定
 1. 活動報告 CBIJ の経年変化、経費など
 2. 予算案修正
- (3) その他
 - ・星薬科大学の講義室やホールの紹介

- 資料：(1) 創薬研究会運営委員会議事録 (2017.1.27)
- (2) 法人会員登録者と講演会参加状況 (サンプル)
- (3) 関西・講演会参加者数と収支
- (4) 関西部会運営委員会議事録 (2017.2.3)
- (5) 講演会予定一覧
- (6) 「秋の学校」案内
- (7) 「日本コンピュータ化学会 2017 春季年会」協賛依頼
- (8) 海外在住者の個人会費決済について
- (9) 総会議案策定資料 (活動報告 CBIJ の経年変化、経費など)



第 29 回執行部会

日時：2017 年 3 月 17 日 (金) 18:55-19:15

場所：A P 西新宿 F 会議室 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 5F)

出席者 (敬称略)：石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、岡部 隆義 (東京大学創薬機構)、河合 隆利 (エーザイ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、多田 幸雄 (東京工業大学)、田中 博 (東北メディカルメガバンク機構 / 東京医科歯科大学)、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)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、田中 成典 (神戸大学)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、福澤 薫 (日本大学)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間俊 (松山大学)

- 議題：(1) 報告事項
- ・会員管理システム兼講演会申込システムの改良
- (2) 討議事項
- ・2017 大会について

- 資料：(1) 2017 年大会 出展状況 (2017.3.17 現在)
- (2) タワーホール船堀 施設利用料金見積書
- (3) 大会広報ポスター (仮)

第 30 回執行部会

日時：2017 年 4 月 28 日 (金) 18:10-19:40

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 506 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、岡部 隆義 (東京大学創薬機構)、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 (東京工業大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、多田 幸雄 (東京工業大学)、田中 成典 (神戸大学、SKYPE)、田中 博 (東北メディカルメガバンク機構 / 東京医科歯科大学)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学、SKYPE)、茂柳 薫 (順天堂大学)、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)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、福澤 薫 (星薬科大学)

議題：(1) 報告事項

- ・2018 年大会長決定
- ・2017 年大会 4 階のリハーサル室と和室 2 キャンセルの報告
- ・SIAM Conference on Parallel Processing for, Scientific Computing (PP18) の協賛承諾の件

(2) 討議事項

1. 2017 年大会について
 - ・スポンサーの状況
 - ・「FMODD・KBDD合同公開シンポジウム」の共催費
 - ・杉田先生のチュートリアル(10/2 開催)の費用負担について
 - ・出展予定の報告
2. 2018 年大会について
 - ・プログラム委員長依頼の件
3. 若手の会について
4. 国際シンポジウムについて
5. 2017 大期間中の総会と評議員会日程について
6. 遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎 IV」の企画協力について

資料：(1) SIAM Conference on Parallel Processing for, Scientific Computing (PP18) 概要

- (2) 2017 年大会 出展状況
- (3) 2017 年大会 予算
- (4) 日台 個別化医療シンポジウム(仮) 企画について

【関西部会】

第 12 回関西部会運営委員会

日時：2017 年 2 月 3 日(金) 10:30-12:00

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル(大阪市北区大深町 3-1) 北館タワー C 9 階 VisLab OSAKA 会議室

出席者(敬称略)：小長谷 明彦(東工大)、六嶋 正知(塩野義製薬)、山崎 一人(大日本住友製薬)、水口 賢司(医薬基盤)、木下 誉富(大阪府立大)、坂田 恒昭(関西副部会長、大阪大、塩野義製薬)、森 浩禎(奈良先端大)、田口 隆久(情報通信研究機構)、志水 隆一(都市活力研究所)、中嶋 久士(興和)、田中 成典(関西部会長、神戸大)、牛尾(書記、神戸大)

欠席者(敬称略)：森 一郎(神戸大)、鶴田 宏樹(神戸大)、正城 敏博(大阪大)、奥野 恭史(京都大)、岡田 随象(大阪大)

議題：(1) 次回(2017 年 5 月 12 日(金))の CBI 学会関西部会講演会について

- (2) 次々回以降の講演会の開催
- (3) 今後の企画・運営、その他

【創薬研究会運営委員会】

第 27 回創薬研究会運営委員会

日時：2017 年 3 月 2 日(木) 10:00-12:20

場所：東京大学山上会館 会議室 001(東京都文京区本郷 7-3-1)

出席者(敬称略)：粟飯 原一弘(Meiji Seika ファルマ)、岡田 興昌(田辺三菱製薬)、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)、相良 武(大鵬薬品工業)、佐藤 秀行(オープンアイ・ジャパン)、嶋田 朋嘉(帝人ファーマ)、高土居 雅法(杏林製薬)、田上 宇乃(味の素)、多田 幸雄(東京工業大学)、谷村 直樹(みずほ情報総研)、増田 友秀(東レ)、徳良 誠健(大正製薬)、中嶋 久士(興和)、新美 達也(アステラス製薬)、緑川 淳(ワールドフュージョン)、小澤 陽子(CBI 学会事務局)

欠席者(敬称略)：石川 誠(日産化学工業)、嶋根 みゆき(中外製薬)、田中 博(東北大学 ToMMo)、本間 光貴(理化学研究所)、
松本 俊二(富士通)、水間 俊(松山大学)

- 議題：(1) 新しい運営委員の紹介
(2) 新しいグループ編成について
(3) 運営委員会主査、副主査について
(4) あらたな研究講演会会場について
(5) 講演会企画進捗状況の報告
(6) グループ討議

- 資料：(1) 新しいグループ編成(案)
(2) 講演会場情報
(3) 講演会予定一覧
(4) Gr6 より進捗状況報告書

【2017 年大会 プログラム委員会】

第 2 回 2017 年大会プログラム委員会

日時：2017 年 3 月 7 日(火) 15:00-17:00

場所：東京工業大学 田町 CIC 2階多目的室 4 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席(敬称略、分野順)：石田 誠一(国立医薬品食品衛生研究所)、石川 岳志(長崎大学、スカイプ参加)、福澤 薫(星薬科大学)、
片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ(株))、多田 幸雄(東京工業大学)、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、スカイプ参加)、小西 智一(秋田県立大学、スカイプ参加)、美宅 成樹(名
古屋大学名誉教授)、茂柳 薫(順天堂大学)、森岡 涼子(国立環境研究所)、水間 俊(松山大学、スカイプ参加)、
菅野 清彦(東邦大学)、本間 光貴(理化学研究所、スカイプ参加)、植沢 芳広(明治薬科大学)、湯田 浩太郎((株)
インシリコデータ)、小長谷 明彦(東京工業大学)、多田 隈 尚史(大阪大学蛋白質研究所)、中嶋 久士(興和(株))、
中村 光浩(岐阜薬科大学、スカイプ参加)、関嶋 政和(東京工業大学、スカイプ参加)、小澤 陽子(CBI 学会事務局)、
塚田 優子(CBI 学会事務局)、小宮山 直美(CBI 学会事務局)

欠席(敬称略、分野順)：宮本 秀一(崇城大学)、山岸 賢司(日本大学)、河合 隆利(エーザイ(株))、高岡 雄司(ダッソー・
システムズ・バイオピア(株))、平山 令明(東海大学)、Paul Horton(産業技術総合研究所)、一石 英一郎(国際医
療福祉大学病院)、田中 博(東北大学 東北メディカル・メガバンク機構 / 東京医科歯科大学)、石川 智久(NPO 法
人地域再興・個別化医療支援)、粕谷 敦(第一三共(株))、木賀 大介(早稲田大学)、萩谷 昌己(東京大学)、田中
成典(神戸大学)、福井 一彦(産業技術総合研究所)、山村 雅幸(東京工業大学)

- 議題：(1) 委員自己紹介(前回欠席者)
(2) フォーカストセッションについて
(3) ポスター投稿について
(4) 開催中の各フロア担当について
(5) 今後の日程の確認
(6) 追記事項

- 資料：(1) フォーカストセッション企画一覧
(2) プログラム枠
(3) FS テンプレート
(4) ポスター投稿規定案
(5) 日程の確認
(6) 会場図



CBI 学会誌 第 5 卷 第 2 号

2017 年 5 月 31 日 発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 藤田 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。

