

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第6卷第2号

2018年5月31日発行

目次

(1) CBI 学会 2018 年大会フォーカストセッション紹介	1
(2) CBI ジャーナル便り (13)	2
(3) 講演会報告・予告	4
(4) 委員会報告	10

Annual Meeting

CBI 2018 年大会

2018 年大会フォーカストセッション等の準備状況

2018 年大会プログラム委員長

上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)

CBI 学会 2018 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、帝人ファーマ(株)の上村です。よろしくお願いたします。CBI 学会 2018 年大会のプログラム委員会も 2 回の開催を終え、国立医薬品食品衛生研究所の西島先生(大会長)、石田先生(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+本年の大会の特徴であるレギュラトリーサイエンスと創薬・医療 AI をフィーチャリングすべく 7 分野に対して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。毎年フォーカストセッションとして開催されているセッションに加えて *In silico* ADME-TOX / 創薬活用の現状と課題として製薬会社での取り組みを直接聞くことのできる貴重なセッションもございます。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その場で議論を交換の場としてご利用いただきたいと思っておりますので、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、口頭発表もご検討いただければ幸いです。投稿は、昨年同様、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。

併せて、本大会においては、公開シンポジウムとして「JST 分子ロボット倫理国際カンファレンス」「毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト AI-SHIPS プロジェクト」、また、市民公開講座として「認知症と向き合うために」を企画しております。フォーカストセッションから国際会議、市民講座まで多岐の分野にわたっておりますが、異分野の研究者同志のクロスセクションの役割としての CBI 学会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心よりお待ちしております。

会期：2018 年 10 月 9 日(火) - 11 日(木)

会場：タワーホール船堀(東京都江戸川区船堀 4-1-1)

テーマ：創薬と育薬のレギュラトリーサイエンス ~AI 創薬時代の新展開 ~

大会 HP：<http://cbi-society.org/taikai/taikai18/index.html>

お問い合わせ：cbi2018@cbi-society.org

CBI ジャーナル便り (13)

CBI Chem-Bio Informatics Journal
Chem-Bio Informatics Society

◆ Web of Science: Emerging Sources Citation Index(ESCI) に掲載

ESCI は、地域的に重要なジャーナルや新しい注目分野のジャーナルをカバーする Web of Science Core Collection のファイルであり、Science Citation Index(SCI) の掲載基準には及ばないが、ジャーナルとして国際的な基準に達しており、かつ今後、質の向上が見込まれるジャーナルを集めたデータベースです。従って、よりグローバルな投稿を期待しています。

◆ 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」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 学会会員の投稿基本料金は無料です。

◆ 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>

「ビタミン D 受容体とキラリティーが異なるリガンド間の特異的相互作用：

ab initio フラグメント分子軌道計算」

武田涼介¹、鈴木理恵¹、小林一徹¹、河合健太郎²、橘高敦史³、上村みどり⁴、栗田典之^{1*}

¹ 豊橋技術科学大学、² 科研製薬株式会社、³ 帝京大学、⁴ 帝人ファーマ株式会社

要旨：ビタミン D 受容体 (VDR) とキラリティーが異なる 2 種類のリガンド間の結合親和性が実験により解析され、リガンドのキラリティーの違いにより、VDR への結合親和性が大きく変化することが見出された。この原因を明らかにするため、VDR と 2 種類のリガンド間の特異的相互作用を、*ab initio* フラグメント分子軌道 (FMO) 計算を用いて調べた。その結果、リガンド中でキラリティーが異なる部位が、VDR のヒスチジン残基側鎖のイミダゾール環と強く相互作用し、VDR とリガンド間の結合特性性がヒスチジンのプロトン化状態に依存することが明らかになった。

「分子ドッキング及びフラグメント分子軌道計算によるクルクミンと
チューブリン間の結合特性の解析」

太田新太郎¹、富岡将吾¹、寒川治城¹、佐藤陸¹、藤森史樹¹、Pavel Karpov²、
Sergey Shulga²、Yaroslav Blume²、栗田典之^{1*}
¹豊橋技術科学大学、²National Academy of Sciences of Ukraine

要旨：健康食品に含まれるクルクミンは、微小管の構成要素であるチューブリンに結合し、チューブリンポリマーの形成を阻害することが報告されている。また、分子ドッキングシミュレーションを用いて、 α チューブリンと β チューブリンから成るヘテロ二量体へのクルクミンの結合部位が予測されている。しかし、クルクミンとチューブリン間の特異的相互作用は、電子レベルでは未解明である。本研究では、チューブリン単量体へのクルクミンの結合部位を明らかにするため、フラグメント分子軌道計算を用いて、クルクミンと熱帯熱マラリア原虫の α チューブリン及び β チューブリンとの結合特性を電子レベルで解析した。その結果、クルクミンは、既存の微小管不安定化剤と同じ程度の強さでチューブリンに結合し、チューブリンのポリマー形成を阻害する薬として機能する可能性があることが明らかになった。

「可視化されたフラグメント分子軌道 (FMO) 計算結果の TensorFlow の応用による解釈」

齊藤天菜¹、飯島潤¹、藤本真悠¹、望月祐志^{1,2*}、奥脇弘次¹、土居英男¹、古明地勇人³
¹立教大学理学部化学科、²東京大学生産技術研究所、³産業技術総合研究所

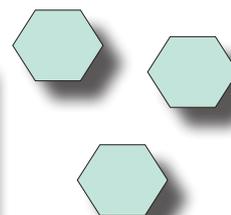
要旨：私達は、可視化されたフラグメント分子軌道 (FMO) 計算の結果を認識させるために、Google の TensorFlow 深層学習ツールキットを応用しました。 α -ヘリックス、および β -シートの典型的なタンパク質構造は、IFIE-map と呼ばれるフラグメント間相互作用エネルギーの 2 次元マップにおいていくつかの特徴的なパターンを提示します (Kurisaki ら、Biophys. Chem. 130 (2007) 1)。18 個のタンパク質と 3 個の非タンパク質系を用いて、 α -ヘリックスと β -シートの存在の有無を示すパターンを有する IFIE-map 画像を千枚ほど作成し、TensorFlow による学習を行いました。学習終了後、TensorFlow に新しいデータを与え、構造パターンを認識する能力をテストしました。その結果、テストの IFIE-map 画像における特徴的な構造が上手く判定されることを見出しました。以上より、TensorFlow による IFIE-map のパターン認識能力が実証されたと言えます。

CBI ジャーナル編集委員会

CBI ジャーナルは J-STAGE にて論文公開しています
<http://www.jstage.jst.go.jp/browse/cbij/-char/en>



講演会 報告



第 392 回 CBI 学会講演会

「創薬研究におけるモレキュラーダイナミックスの実際」

日時：2018 年 3 月 2 日（金）13:15-17:30

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：岡田 興昌（田辺三菱製薬株式会社）、江頭 啓（小野薬品工業株式会社）、緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）

プログラム：

- (1) 13:15-13:25 はじめに
- (2) 13:25-14:05 「分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬」
小久保 裕功（Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社）
- (3) 14:05-14:45 「Lead Discovery by Affinity and *in vitro* ADMET predictions」
武富 啓（田辺三菱製薬株式会社）
- (4) 14:45-15:25 「Application of Molecular Dynamics and Fragment Molecular Orbital Method in Drug Discovery」
鷹羽 健一郎（旭化成ファーマ株式会社）
- (5) 15:40-16:20 「創薬研究における分子動力学シミュレーション」
嶋田 朋嘉（帝人ファーマ株式会社）
- (6) 16:20-17:20 「ATP synthase, a paragon of biological molecular motors」
Prof. Chris Chipot (Vandoeuvre-les-Nancy cedex, France, and Department of Physics, University of Illinois at Urbana-Champaign)
- (7) 17:20-17:30 おわりに



開催報告：

モレキュラーダイナミクス (MD) 計算は、2013 年カープラス教授らのノーベル化学賞受賞からも分かるようにその有用性は広く知られている。タンパク質や生体分子の振る舞いのシミュレーション手法として創薬現場で利用されているが、実際の現場でどのように利用されているのか、利用できるのかを共有し議論することを目的として開催した。本会では、創薬現場で MD 計算ソフトウェアを利活用されておられる製薬会社の 4 名の研究者の先生および MD 計算ソフトウェア (NAMD) の開発者の先生による講演を頂いた。

Axcelead・小久保先生より、分子シミュレーションを用い、相互作用の物理化学的背景の理解に基づいた創薬分子設計を目的として開発した様々な手法をご紹介頂いた。リガンド結合モード予測、活性予測、FBDD(Fragment Based Drug Design) の研究事例のご紹介、次世代 SBDD(Structure Based Drug Design) や自動デザイン、AI を活用した MD 解析などの展望も述べられた。

田辺三菱製薬・武富先生より、X 線結晶構造を有する標的タンパク質の計算手法のみを用いて、創薬プロジェクトにおける HTS ヒットからリード化合物を得るといった課題への取り組みを紹介頂いた。その結果、1 年・50 化合物以下の合成で、新しい骨格を見出したことを報告され、また、このプロジェクトを通じて明らかとなった課題についても議論された。

旭化成ファーマ・鷹羽先生より、MD 計算と FMO 計算を組み合わせ、複数の複合体構造の生成とその結合状態の推定や活性予測について述べられ、創薬プロジェクトへの応用も紹介された。また、合成化学者が利用可能な X 線結晶構造と MD 計算や FMO 計算のシミュレーション結果を蓄積、共有するための Web システムについてもご紹介頂いた。

帝人ファーマ・嶋田先生より、活性発現時に大きな構造変化を伴う酵素の *in silico* による阻害剤探索法をご紹介頂いた。大きな構造変化の解析には長時間の MD 計算を要するが、メタダイナミクス法により構造変化を化合物による阻害を効率良く評価するという解析事例をご紹介頂いた。

イリノイ大学の Christophe Chipot 先生より、プロトンの濃度勾配を利用して ATP の合成を行う ATP synthase に関するご研究をご紹介頂いた。非常に大規模な系の 65 μ s に及ぶ長時間の MD 法に基づく自由エネルギー計算によって、ATP の加水分解に伴う化学エネルギーが回転運動に変換される動作機構をご講演頂いた。

尚、本会は講師を含めて 96 名のご参加を頂き質疑も活発で盛況であった。多くの方のご助力で有意義な講演会になったことを感謝いたします。



小久保 裕功 先生



武富 啓 先生



鷹羽 健一郎 先生



嶋田 朋嘉 先生



Chris Chipot 先生

第 393 回 CBI 学会講演会

「中分子創薬の実現にむけて」

日時：2018 年 3 月 16 日（金）13:10-17:40

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：石川 誠（日産化学工業株式会社）、狩野 敦（株式会社モルシス）、相良 武（大鵬薬品工業株式会社）

プログラム：

- (1) 13:10-13:20 はじめに
- (2) 13:20-14:05 「環状ペプチド天然物の全合成と三次元構造—活性解析」
土井 隆行（東北大学大学院薬学研究科）
- (3) 14:05-14:40 「ペプチドを用いた細胞内デリバリー」
二木 史朗（京都大学化学研究所）
- (4) 15:05-15:50 「独自技術によるペプチド合成と創薬」
金井 和昭（JITSUBO 株式会社）
- (5) 15:50-16:35 「X-Chem' s DNA-Encoded Library Drug Discovery Platform: Identification of Peptide and Macrocyclic Leads」
Dr. Allison Olszewski（米国 X-Chem 社）
- (6) 16:45-17:30 「糸状菌未利用合成遺伝子を活用するポストゲノム型天然物探索研究」
浅井 禎吾（東京大学大学院総合文化研究科）
- (7) 17:30-17:40 総括



土井 隆行 先生



二木 史朗 先生



金井 和昭 先生



Allison Olszewski 先生



浅井 禎吾 先生



開催報告：

近年、新たな創薬のモダリティの1つとして中分子が注目されていますが、中分子創薬を実現するためには、分子量の増大に伴う細胞膜透過性の低下やリード創製・最適化段階における合成上の問題点等、いくつかの課題があることが知られています。今回の研究講演会では、中分子創薬に関連する研究領域で実績を上げておられる先生方に、最先端の成果や将来のビジョンについて異なる角度からご講演頂きました。

まず、土井隆行先生から、環状ペプチド天然物の全合成と三次元構造を用いた活性解析についてご講演頂きました。中分子医薬品に関する特徴のわかりやすい解説の後、多様な化合物群が存在する環状ペプチド天然物や、固相法をベースにした効率的な合成方法および三次元構造と生物活性や膜透過性に与える影響について、分子シミュレーションの結果なども交えて詳しく解説して頂きました。

二木史朗先生から、効率的なタンパク質の細胞内送達を実現する新規ペプチドの開発についてご講演頂きました。細胞毒性の低減とエンドソーム膜に対する効果的な傷害性の発揮を目指して開発された特殊ペプチド L17E が、細胞膜とエンドソーム膜の脂質組成の違いを認識してエンドソーム膜を不安定化することを論証しました。L17E を介してエンドソームへの高分子薬物の取り込み効率を高めることで、より効果的な細胞質への送達を可能にすることが期待されています。

金井和昭先生から、JITSUBO (株) における最新のペプチド合成技術 Molecular Hiving 法と Peptune 法についてご講演頂きました。Molecular Hiving 法は、縮合反応が液相であることから縮合反応の効率が高く、また、工業化の際のスケールアップが容易で、高純度のペプチドを安価に大量生産する技術として注目されています。また、Peptune 法は、ペプチドの架橋技術として、橋頭 2 級アミン部分に様々な分子を結合することにより、化学的物性の改善や新規な機能の追加も可能な次世代のペプチド創薬ツールです。

Allison Olszewski 先生から、X-Chem 社における DNA コードライブラリースクリーニングと情報科学プラットフォームによる中分子のスクリーニングの事例についてご講演頂きました。コンビナトリアル合成された 1 千億化合物を超えるライブラリーを用いたスクリーニングを行い情報科学プラットフォームにより得られた化合物の特徴付けから、幅広い化合物のリード探索を行います。化合物は DNA タグコードにより効率的な増幅が可能です。巨大ライブラリーとそのスクリーニング技術により、ペプチドや大環状構造を持つ化合物など中分子の効率的なリード探索を可能とします。

浅井禎吾先生から、未利用遺伝子を活用するポストゲノム時代の新しい天然物探索研究についてご講演頂きました。糸状菌のゲノム上には、通常の培養条件では物質生産に利用されない休眠型二次代謝物合成遺伝子が数多く存在し、その中には既知化合物からは連想されない全く新しい二次代謝物をコードするものも数多く存在することを明らかにしました。そして、これら未利用遺伝子を遺伝子資源として麹菌で異種発現させることにより新規天然物が創生できることを実証しました。休眠遺伝子の活用が「ポストゲノム型天然物探索」として注目を集めています。今回の公演では、中分子創薬の実現にむけた最先端の取り組みについて聴くことができ、また、限られた時間でしたが討論することができました。ご講演頂きました先生方には、この場をお借りして深くお礼申し上げます。



CBI ワークショップ



「NAMD による自由エネルギー計算の講義と実習、及び、TSUBAME3.0 の見学会」

共催：東京工業大学学術国際情報センター 計算化学研究会（主査 川内 進）

日時：2018年3月5日（月）9:30-17:00

場所：東京工業大学（大岡山キャンパス）学術国際情報センター 3階 第2実験室（東京都目黒区大岡山 2-12-1）

講師：Prof. Christophe Chipot (University of Illinois at Urbana-Champaign Vandoeuvre-les-Nancy cedex, France, and Department of Physics)

アシスタント：竹村 和浩（東京大学）

世話人：渡邊 寿雄（東京工業大学学術国際センター）、岡田 興昌（田辺三菱製薬株式会社）

江頭 啓（小野薬品工業株式会社）、緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）

スケジュール：

1. 9:30 - 10:00 受付
2. 10:00 - 12:00 講義
3. 12:00 - 13:00 休憩
4. 13:00 - 16:00 実習
5. 16:00 - 17:00 TSUBAME3.0 見学（学術国際情報センター内）



Chris Chipot 先生



ワークショップ参加者の皆さん

開催報告：

今回の自由エネルギー計算の講義と NAMD を利用したチュートリアルに 15 名の方にご参加いただきました。午前中のセッションでは、自由エネルギー計算に関する過去から現在に至る技術の発展やそれに関与した研究者の話、及び、実際に分子動力学法による計算方法の詳細をご説明いただきました。午後のセッションでは、あらかじめ用意されておりました 4 種類の難易度の異なるレベルの課題の中から、個々の参加者が目的やレベルに合わせて選択し、自由エネルギー計算に取り組んでいただきました。共催の東京工業大学の渡邊先生にはあらかじめ必要なプログラムをインストールしていただき、また、竹村先生には技術的なサポートをいただきましたので、トラブルも少なくスムーズにチュートリアルを実施することができました。チュートリアル後にはグリーンスパコン TSUBAME3.0 の見学会も実施され、有意義な講習会になったと考えております。



今後の講演会 予定



第 396 回 CBI 学会講演会

「薬物動態領域における新しい解析ツール、クラスターニュートン法 (CNM); 薬物間相互作用、
遺伝子多型の *in vivo* 解析およびバーチャルクリニカルスタディへの応用」

日時：2018 年 6 月 7 日 (木) 10:30-17:30

場所：東京大学農学部 弥生講堂一条ホール

世話人：杉山 雄一 (理化学研究所杉山特別研究室)、前田 和哉 (東京大学大学院薬学系研究科)

第 397 回 CBI 学会講演会

「データ駆動型の創薬アプローチ ～探索、リポジショニングから安全性まで～」

日時：2018 年 7 月 30 日 (月) 13:30-17:40

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

世話人：中嶋 久士 (興和株式会社)、谷村 直樹 (みずほ情報総研株式会社)、増田 友秀 (東レ株式会社)

第 398 回 CBI 学会講演会

「Beyond the pill」

日時：2018 年 9 月 28 日 (金) 13:00-17:00

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル

世話人：坂田 恒昭 (大阪大学 / 塩野義製薬株式会社)、山崎 一人 (大日本住友製薬株式会社)

六嶋 正知 (塩野義製薬株式会社)



Committee

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 10 回特定非営利活動法人情報計算化学生物学会総会

日時：2018 年 3 月 22 日 (木) 18:20-19:00

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 4F J+K 会議室)

出席者数等 出席者 9 名、正会員総数 16 名

審議事項：第 1 号議案 2017 年度活動報告

第 2 号議案 2017 年度決算報告・監査報告

第 3 号議案 2018 年度活動計画

第 4 号議案 2018 年度予算

第 5 号議案 2018 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 12 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：2018 年 3 月 22 日 (木) 19:00-19:10

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 4F J+K 会議室)

出席者：理事総数 7 名 うち出席者数 5 名

審議事項：第 1 号議案 理事の選任の件

第 13 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：2018 年 4 月 26 日 (木) 18:00-18:15

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 4F J+K 会議室)

出席者：理事総数 8 名 うち出席者数 6 名 (本人出席 5 名、委任状提出者 1 名)

審議事項：第 1 号議案 理事長の選任の件



【執行部会】

第 37 回執行部会

日時：2018 年 2 月 27 日 (火) 17:30-19:00

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 509 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：(敬称略) 片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、池田 和由 (慶応義塾大学)、石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、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)、上村 みどり (帝人ファーマ)、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 (CBI 学会事務局)、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)、中嶋 久士 (興和)、広川 貴次 (産業技術総合研究)、福澤 薫 (星薬科大学)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学 Skype)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)

欠席者：(敬称略) 茂樺 薫 (順天堂大学)

議題：(1) 報告事項

1. 日本コンピュータ化学会 2018 春季年会の協賛

(2) 討議事項

1. 2018 年大会について
2. 執行部会の役職制について
3. 評議員の入れ替えについて
4. 定期総会議案策定 (活動報告、決算、活動計画、予算)
5. 理事の推薦

資料：(1) 日本コンピュータ化学会 2018 春季年会から『CBI 学会の共催・協賛・後援の名義使用』申請について (依頼書)

- (2) 2018 年大会プログラム案
- (3) 市民講座企画
- (4) 執行部会での役職
- (5) 評議員・アドバイザーリスト
- (6) 総会資料 (案)

第 38 回執行部会

日時：2018 年 3 月 22 日 (火) 19:10-19:55

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

出席者：(敬称略) 池田 和由 (慶応義塾大学)、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)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、多田 幸雄 (CBI 会事務局)、田中 成典 (神戸大学 Skype)、中嶋 久士 (興和)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学 Skype)、茂樺 薫 (順天堂大学)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)

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)、上村みどり (帝人ファーマ)、相良 武 (大鵬薬品工業)、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)、福澤 薫 (日本大学)

議題：(1) 討議事項

1. 2018 年大会について
2. 2020 年大会について

3. 事務所移転について
4. CBI ジャーナルの分野および editor の見直しについて
5. 創薬研究会運営委員会のメーリングリストについて
6. CBI ジャーナルの発行の連絡頻度について

資料: (1) 2018 年大会プログラム枠
(2) 今後の大会日程

第 39 回執行部会

日時: 2018 年 4 月 26 日 (火) 18:15-19:35

場所: AP 西新宿 J+K 会議室 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 4F)

出席者: (敬称略) 片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、池田 和由 (慶應義塾大学)、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 (イーザイ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)
田中 成典 (神戸大学 Skype)、中嶋 久士 (興和)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、福澤 薫 (星薬科大学)、水間 俊
(帝京平成大学)、茂榎 薫 (順天堂大学)、塩塚 真理 (CBI 学会事務局)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)
欠席者: (敬称略) 石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、上村 みどり (帝人ファーマ)、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)、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)
本間光貴 (理化学研究所)

議題: (1) 報告事項

1. 2018-2019 年度評議員決定
2. CBI 学会 2018 年大会他学会への協賛等と広報依頼状況
3. 「D2K サイエнтиスト緊急養成研究集会」後援

(2) 討議事項

1. 2018 年大会について
2. 2019 年大会プログラム委員長、大会実行委員について
3. 若手の会について
4. CBI 法人会員約款の改定について
5. 研究推進委員会委員長の委嘱について
6. 上原記念生命科学財団からの研究助成拡大のチラシ配布について
7. 日本コンピュータ化学会からの 2018 秋季年会 (2018/11/03 ~ 04) 協賛依頼について
8. 事務所移転について
9. Optibrium Ltd、Lhasa Limited、BioSolveIT GmbH 主催創薬シンポジウム
「Symposium on Streamlining Drug Discovery」開催案内 (6 月 5 日) 配信について
10. Editorial Manager(EM) 投稿審査システムの説明

資料: (1) 2018-2019 年度役員名簿

- (2) 他学会への協賛等と広報依頼状況
- (3) 「D2K サイエнтиスト緊急養成研究集会」プログラム
- (4) 2018 年大会収支計画書と収入見込み
- (5) 2018 年大会出展状況
- (6) 大会期間中の会合一覧
- (7) CBI 法人会員約款
- (8) 協賛依頼: 日本コンピュータ化学会 2018 秋季年会 (2018/11/03 ~ 04、弘前)

【関西部会】

第 16 回関西部会運営委員会

日時：2018 年 3 月 5 (月) 11:00-12:00

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 (大阪府大阪市北区大深町 3-1)

出席者：(敬称略) 木下 誉富 (大阪府立大学)、田中 成典 (関西部会長、神戸大学)、坂田 恒昭 (関西副部会長、大阪大学 / 塩野義製薬)、藤淵 航 (京都大学)、森 浩禎 (奈良先端大学)、山崎 一人 (大日本住友製薬)、六嶋 正知 (塩野義製薬)
牛尾 律子 (書記、神戸大学)

欠席者：(敬称略) 植松 直也 (大塚製薬)、岡田 随象 (大阪大学)、奥野 恭史 (京都大学)、小長谷 明彦 (東京工業大学)
志水 隆一 (都市活力研究所)、田口 隆久 (情報通信研究機構)、鶴田 宏樹 (神戸大学)、中嶋 久士 (興和)、水口 賢司
(医薬基盤・健康・栄養研究所)、森 一郎 (神戸大学)

議題：(1) 次回 (2018 年 5 月 18 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について
(3) 2019 年以降の関西 CBI 講演会のテーマ候補について

【創薬研究会運営委員会】

第 32 回創薬研究会運営委員会

日時：2018 年 2 月 14 日 (水) 10:00-12:00

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 2 階多目的室 4 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：(五十音順・敬称略) 池田 和由 (慶應義塾大学)、石川 誠 (日産化学工業)、江頭 啓 (小野薬品工業)、大川 和史
(旭化成ファーマ)、大槻 幸恵 (大鵬薬品工業)、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 (モルシス)、熊澤 啓子 (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)、佐藤 秀行
(オープンアイ・ジャパン)、嶋根 みゆき (中外製薬)、高土居 雅法 (杏林製薬)、高橋 一敏 (味の素)、多田 幸雄 (CBI 学
会事務局)、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)、前野 恭一 (アステラス製薬)
松本 俊二 (富士通)、増田 友秀 (東レ)、三井 崇志 (富士通)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、小澤 陽子 (CBI 学
会事務局)、塩塚 真理 (CBI 学会事務局)

欠席者：(敬称略) 粟飯 原一弘 (Meiji Seika ファルマ)、岡部 隆義 (東京大学創薬機構)、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)、谷村 直樹 (みずほ情報総研)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学)

議題：(1) 報告事項

1. 新規法人会員ご紹介
2. 窓口 (創薬研究会運営委員) 交代
3. 企業からの CBI 学会評議員について
4. 若手の会メンバーについて
5. 若手の会主査のご紹介

(2) 討議事項

1. 研究講演会企画
2. 東工大田町で講演会の実施した場合の懇親会のあり方について
3. 2018 年大会について
4. CBI ジャーナルの Reviewer に外国の先生をお迎えするについて

5. 参加企業が主催するセミナー等の日程について
6. グループウェアについて

第 33 回創薬研究会運営委員会

日時：2018 年 3 月 16 日 (金) 10:00-12:00

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 2階多目的室 4 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：(五十音順・敬称略) 粟飯 原一弘 (Meiji Seika ファルマ)、大川 和史 (旭化成ファーマ)、大槻 幸恵 (大鵬薬品工業)
片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦 (モルシス)、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)、高土居 雅法 (杏林製薬)、高橋 一敏 (味の素)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)
中嶋 久士 (興和)、前野 恭一 (アステラス製薬)、三井 崇志 (富士通)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)、塩塚 真理 (CBI 学会事務局)

欠席者：(敬称略) 石川 誠 (日産化学工業)、江頭 啓 (小野薬品工業)、岡田 興昌 (田辺三菱製薬)、熊澤 啓子 (帝人ファーマ)
嶋根 みゆき (中外製薬)、谷村 直樹 (みずほ情報総研)、徳良 誠健 (大正製薬)、増田 友秀 (東レ)、松本 俊二 (富士通)
緑川 淳 (ワールドフュージョン)

議題：(1) 報告事項

1. 窓口 (創薬研究会運営委員) 交代

(2) 討議事項

1. 研究講演会企画について
2. 2018 年大会について
3. 若手の会について
4. 運営委員会特別講演会実施について
5. CBI ジャーナルについて

資料：(1) 講演会予定一覧

- (2) 2018 年大会プログラム案

【2018 年大会 拡大実行委員会】

第 3 回 2018 年大会拡大実行委員会

日時：2018 年 2 月 27 日 (火) 15:00-16:45

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 509 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：(敬称略) 西島 正弘 (昭和薬科大学)、石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、高柳 輝夫 (公益財団法人
ヒューマンサイエンス振興財団)、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)、諫田 泰成
(国立医薬品食品衛生研究所)、佐藤 薫 (国立医薬品食品衛生研究所)、石川 岳志 (長崎大学 Skype)、福澤 薫
(星薬科大学)、荻島 創一 (東北メディカル・メガバンク機構 Skype)、水間 俊 (松山大学 Skype)、上村 みどり
(帝人ファーマ)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、広川 貴次 (産業技術総合
研究所)、本間 光貴 (理化学研究所)、中嶋 久士 (興和)、小宮山 直美 (CBI 学会事務局)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)

欠席者：(敬称略) 植沢 芳広 (明治薬科大学)、奥田 晴宏 (国立医薬品食品衛生研究所)、鈴木 洋史 (東京大学病院)

議題：(1) プレナリー講演・招待講演の決定、座長の決定

- (2) サブタイトルについて
- (3) 出展・スポンサーの状況確認

- 資料：(1) プログラム案
(2) 出展募集の詳細

【2018 年大会 プログラム委員会】

第 2 回 2018 年大会プログラム委員会

日時：2018 年 3 月 20 日 (火) 10:00-12:00

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 2 階多目的室 4 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：(敬称略、分野順) 上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)、石川 岳志 (長崎大学 Skype)、福澤 薫 (星薬科大学)
多田 幸雄 (CBI 学会事務局)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)
水口 賢司 (医薬基盤・健康・栄養研究所 Skype)、荻島 創一 (東北メディカル・メガバンク機構 Skype)、美宅 成樹
(名古屋大学名誉教授)、石川 智久 (NPO 法人地域再興・個別化医療支援 電話)、本間 光貴 (理化学研究所)
植沢 芳広 (明治薬科大学)、湯田 浩太郎 (インシリコデータ)、石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、田中 成典
(神戸大学 Skype)、多田隈 尚史 (大阪大学蛋白質研究所)、藤淵 航 (京都大学 iPS 細胞研究所 Skype)、中嶋 久士
(興和)、中村 光浩 (岐阜薬科大学 Skype)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)、小宮山
直美 (CBI 学会事務局)

欠席者：(敬称略、分野順) 山岸 賢司 (日本大学)、河合 隆利 (エーザイ)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、茂櫛 薫
(順天堂大学)、水間 俊 (松山大学)、関嶋 政和 (東京工業大学)

- 議題：(1) フォーカストセッションについて
(2) 大会のプログラム
(3) ポスター投稿の分野およびキーワードの追加・調整
(4) ポスター会場レイアウトについて
(5) ポスター採択までの流れ
(6) 大会プロモーション
(7) 次回会合について

- 資料：(1) 第 1 回プログラム委員会議録
(2) プログラム枠
(3) FS 要旨テンプレート
(4) ポスター会場図
(5) 昨年のポスター投稿分野区分



CBI 学会誌 第 6 卷 第 2 号

2018 年 5 月 31 日 発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：塚田 優子 小澤 陽子 小宮山 直美 藤田 真澄

塩塚 真理 高橋 まき 牛尾 律子

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

