生命医薬情報学連合大会

CBI学会2013年大会

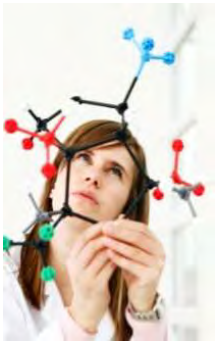
2013年日本バイオインフォマティクス学会年会

オミックス医療研究会年会

Joint Conference on Informatics in Biology, Medicine and Pharmacology

October 28 (Mon) - 31 (Thu), 2013

Tower Hall Funabori (4-1-1 Funabori, Edogawa-ku, Tokyo)



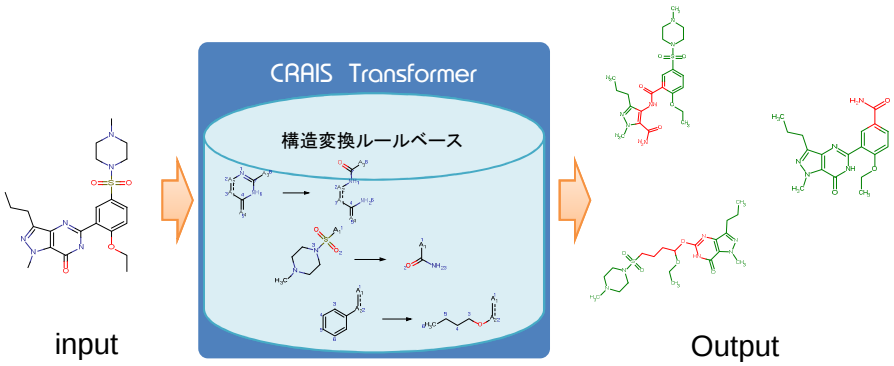
社内外の構造変換知識を合成展開に活用

CRAIS Transformer

構造を描画しクリックするだけで「これは面白い！」という変換アイデアを提示

■CRAIS Transformerとは

- 置換ルールに基づき改変構造を自動生成します。
- 課題に応じて、置換部位の制限、骨格の制限、適用ルールの制限、生成物の各種プロパティー制限を行えます。
- Webブラウザーから利用可能で、様々な表示形式で、アイディア構造を参照できます。
- 自社データの取り込み、ルールとして活用可能です。



より良い構造をより速く!!

置換ルールベース

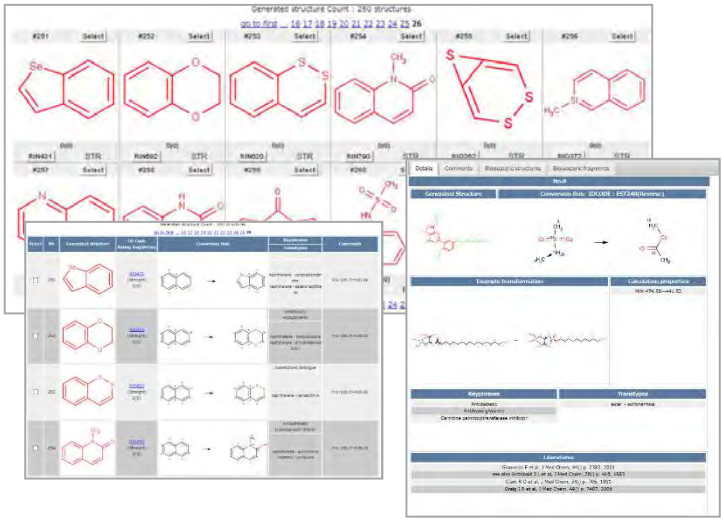
自社ルール
- MMP解析結果などをルールとして追加可能

EMIL（標準添付）
- 監修：藤田稔夫京都大学名誉教授
- Bioisostericな約6,700件の変換例を収録

BIOSTER（2014年4月リリース）
- 監修：Dr. Istvan Ujvary (元The Hungarian Academy of Sciences)
- Bioisostericな約2万6千件の変換例を収録
- 別途単体のデータベースとしても販売可能
- 毎年1,000件程度の新規変換例を追加予定

■主な機能

- Webアプリケーションでどこからでも利用可能
- 生成構造のプロパティー計算、プロパティーによる絞込み
- 自社ルールを登録可能
  （KNIME, Pipeline PilotのMMP解析結果を一括インポート）
- 生成構造の出力（SDファイル/Excel/PDF）
- 構造転換の根拠となる変換ルール・文献情報を表示可能



生成構造の絞り機能

絶対値による指定
- LogPが5以下となる構造のみ生成

入力構造との比較値による指定
- リング数が入力構造より小さくなる構造のみ生成

上記の組み合わせ
- キラルカウントが1以下で、かつ分子量が入力構造よりも小さい構造のみ生成

以下の物性値を指定可能
- pKa, Microspecies, Isoelectric Point
- logP, logD
- Topology Analysis, Geometry, Molecular Surface Area (3D)、PSA(2D)
- Charge (Charge, Polarizability, Orbital Electronegetivity)
- Mass, Atom count
- HBDA

お問合せ：
パトコア株式会社 www.patcore.com
info@patcore.com Tel. 03-5422-7101
担当：有賀、松本

Joint Conference on Informatics
in Biology, Medicine and Pharmacology

"Omics, Informatics and Drug Discovery"

Dates : October 28 (Mon) - 31 (Thu), 2013
Venue : Tower Hall Funabori (4-1-1 Funabori, Edogawa-ku, Tokyo)

生命医薬情報学連合大会
「オミックス・計算 そして創薬」

日時： 2013 年 10 月 28 日(月)－31 日(木)
会場： タワーホール船堀（東京都江戸川区船堀 4-1-1）

Conference Chairperson :
Tetsuo Nagano (The University of Tokyo)
Co-organizers :
Takayoshi Okabe (The University of Tokyo)
The Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2013
Kenta Nakai (The University of Tokyo)
The 2013 Annual Conference of the Japanese Society for Bioinformatics
Masaaki Muramatsu (Tokyo Medical and Dental University)
2013 annual convention of Japan Association for Omics-baced Medicine

大会長： 長野 哲雄（東京大学）
実行委員長：
CBI 学会 2013 年大会 大会実行委員長
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）
2013 年 日本バイオインフォマティクス学会年会長
中井謙太（東京大学医科学研究所）
2013 年 オミックス医療研究会年会長
村松正明（東京医科歯科大学）

Contents
目次

生命医薬情報学連合大会 大会長挨拶 1

実行委員長挨拶 3

協賛学会・大会スポンサー 4

会場案内図・出展一覧 6

プログラム 11

基調講演・特別セッション 19

CBI 学会大会

　招待講演 25

　公開シンポジウム 43

　フォーカストセッション 51

　2013 大会実行委員会 61

JSBi 年会

　バイオインフォマティクス研究者・技術者のキャリアを考えるセッション 65

　JSBi2013 組織委員・プログラム委員 66

Omix 年会

　シンポジウム 69

チュートリアル・ランチョンセミナー・

スポンサードセッション・オーガナイズドセッション 77

企業広告 115

生命医薬情報学連合大会 大会長挨拶

今回で二回目となる「生命医薬情報学連合大会」は、昨年と同様、情報計算化学生物学会（CBI 学会)、日本バイオインフォマティクス学会（JSBi)、オミックス医療研究会（Omix)、三者の連合大会として開催します。場所も同じく江戸川区タワーホール船堀です。

今大会のテーマは三学会のこれまでの活動内容と私の大学での研究分野を関連付け「オミックス・計算　そして創薬」としました。

取り上げる内容は多彩です。キーワードを挙げれば、ヒトゲノム解析、次世代シークエンサー、コホート解析、スーパーコンピューティング、量子化学計算（FMO 法)、公共データベース利用、iPS 細胞、in Silico　ADMET、アカデミア創薬、ドラッグ リポジショニング、オミックス医療などです。これらの研究発表の他に、今回は新しい試みとして、若手研究者向けのチュートリアルやキャリアセミナーを開催します。さらに科研費新学術領域「分子ロボティクス」、「合成生物学」との共催セッションもあります。またポスター会場では 10 月 29 日、30 日の夕方にミキサーを行い、じっくり意見交換できる場を提供します。

「創薬」の源流には様々な流れがあります。研究におけるイノベーションの重要性はあらためて述べるまでもありませんが、イノベーションを促進させるには、産官学連携はもとより、異分野間の交流やぶつかりあいが何よりも重要です。本大会の参加者におきましては、其々の所属学会を意識することなく、いろいろな会場に気軽に顔を出し、異なった分野の研究者と話をする機会を持っていただきたいと思います。そして、そのような場として本大会が機能することができれば、本大会は成功と言えるでしょう。

最後に、本大会の企画や会場等の準備に携わった各学会の実行委員、事務局の皆様のご協力に感謝いたします。

生命医薬情報学連合大会　大会長　長野哲雄

実行委員長挨拶

CBI 学会では主テーマとして「創薬」を設定し、アカデミア創薬、計算創薬などを取り上げます。主テーマに沿った招待講演の他、FMO 研究会、化合物ライブラリーなど特定分野のフォーカストセッションも企画し、参加者が活発に討論できる場を提供します。さらに CBI 学会の今後の関心領域として、科研費新学術領域「分子ロボティクス」、「合成生物学」に参加を呼びかけ、共催のセッションや、公開シンポジウムを行います。

多くの方がご参加し、関心・興味の枠を広げていただけることを期待しております。

CBI 学会 2013 年大会　実行委員長　岡部隆義

今年度は、CBI 学会との共催としては３年目、オミックス医療研究会も加えた生命医薬情報学連合大会としては２年目になります。それぞれ異なる文化や伝統を背負った学会・ 研究会の年会を共催するにあたっては、互いに妥協を強いられることもありました。ここまで共催に向けて辛抱強くご尽力いただいた関係者の皆様には、この機会に御礼を言わせていただくと同時に、参加者の皆様方には、幅広いバックグラウンドや立場の参加者が集うこの機会を存分に楽しんでいただければ幸いです。

日本バイオインフォマティクス学会年会　 2013 年度実行委員長　中井謙太

オミックス医療研究会の今年の年会では、最近注目を集めているに感染症及びパーソナルゲノムをめぐる話題で二つのセッションを組みました。大勢の方々のご参集をお待ちしております。

オミックス医療研究会年会　実行委員長　村松正明

Academic Association・Sponsors

協賛学会・大会スポンサー

Academic Association

The Molecular Biology Society of Japan
The Japanese Society for the Study of Xenobiotics
The Biophysical Society of Japan
The Japanese Biochemical Society
Young Researchers Group for Computational, Omics, and Systems Biology in Japan
The Japanese Society for Artificial Intelligence

協賛学会

日本分子生物学会
日本薬物動態学会
日本生物物理学会
日本生化学会
生命情報科学若手の会
人工知能学会

Sponsors

Luncheon Seminar, Sponsored Session, Tutorial, Organized Session

Illumina K.K.
User's community for NGS field sponsored by MITSUI KNOWLEDGE INDUSTRY CO.,LTD.
Osaka University Graduate School of Engineering Science - HPCI Education Program for Predictive Medicine, Lifescience and Bioengineering
Genaris, Inc.
TSUBAKIMOTO CHAIN CO.
DNA Chip Research Inc.
Human Genome Center, the Institute of Medical Science, the University of Tokyo
Tohoku University Tohoku Medical Megabank Organization
TOMY DIGITAL BIOLOGY CO., LTD.
NABE International Corp.
Japanese Society for Alternative to Animal Experiments
PerkinElmer Japan Co., Ltd.
Patcore, Inc.
Mizuho Information & Research Institute, Inc.
The Database Center for Life Science, ROIS
Life Technologies Japan Ltd.
World Fusion Co., LTD.

大会スポンサー

ランチョンセミナー・スポンサードセッション・チュートリアル・オーガナイズドセッション

イルミナ株式会社
NGS 現場の会 sponsored by 三井情報株式会社
大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCI 戦略分野１「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム
株式会社ジナリス
株式会社椿本チエイン
株式会社 DNA チップ研究所
東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター
東北大学 東北メディカル・メガバンク機構
トミーデジタルバイオロジー株式会社
株式会社ナベ インターナショナル
日本動物実験代替法学会
株式会社パーキンエルマージャパン
パトコア株式会社
みずほ情報総研株式会社
ライフサイエンス統合データベースセンター, ROIS
ライフテクノロジーズジャパン株式会社
株式会社ワールドフュージョン

Exhibition Booth

iPS Academia Japan, Inc.
Accelrys K.K.
MEDICAL & BIOLOGICAL LABORATORIES CO.,LTD.
Japan Biological Informatics Consortium
INFOCOM CORPORATION
Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University (OIST)
Kyoto Constella Technologies Co., Ltd./ Affinity Science Corporation
Kobe City HPC Cluster／ Foundation for Computational Science
CONFLEX Corporation
SCHRÖDINGER
TALOU CO.,LTD
Human Genome Center, the Institute of Medical Science, the University of Tokyo
Thomson Reuters
NABE International Corp.
The National Bioscience Database Center, JST/ The Database Center for Life Science, ROIS
Hitachi Solutions, Ltd.
Life Technologies Japan Ltd.
Ryoka Systems Inc.
World Fusion Co.,LTD.

Advertisement

Japan Association for International Chemical Information (JAICI)
KIKO TECH CO.,LTD.
X-Ability Co.,Ltd.
Kobe City HPC Cluster／ Foundation for Computational Science
Patcore, Inc.
Hitachi, Ltd.
YODOSHA CO.,LTD.
Ryoka Systems Inc.

展示ブース

iPS アカデミアジャパン株式会社
アクセルリス株式会社
株式会社医学生物学研究所
一般社団法人　バイオ産業情報化コンソーシアム
インフォコム株式会社
沖縄科学技術大学院大学（OIST）

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ/ 株式会社アフィニティサイエンス
神戸 HPC クラスター／ FOCUS（計算科学振興財団）
コンフレックス株式会社
シュレーディンガー
株式会社タロウ
東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター

トムソン・ロイター
株式会社ナベ インターナショナル
バイオサイエンスデータベースセンター, JST/ ライフサイエンス統合データベースセンター, ROIS
株式会社日立ソリューションズ
ライフテクノロジーズジャパン株式会社
株式会社菱化システム
株式会社ワールドフュージョン

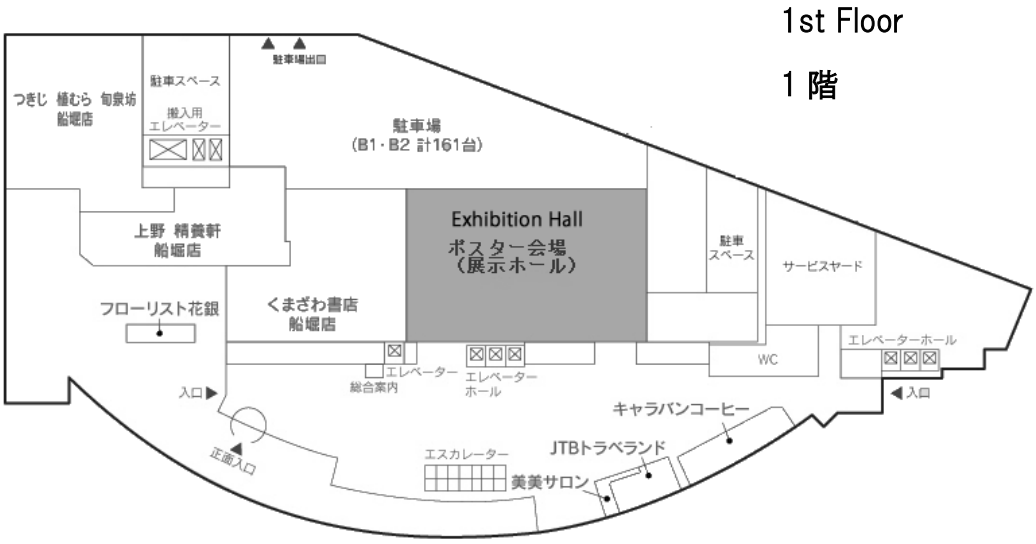
広告掲載

一般社団法人 化学情報協会

キコーテック株式会社
株式会社クロスアビリティ
神戸 HPC クラスター／ FOCUS（計算科学振興財団）
パトコア株式会社
株式会社日立製作所
株式会社羊土社
株式会社菱化システム

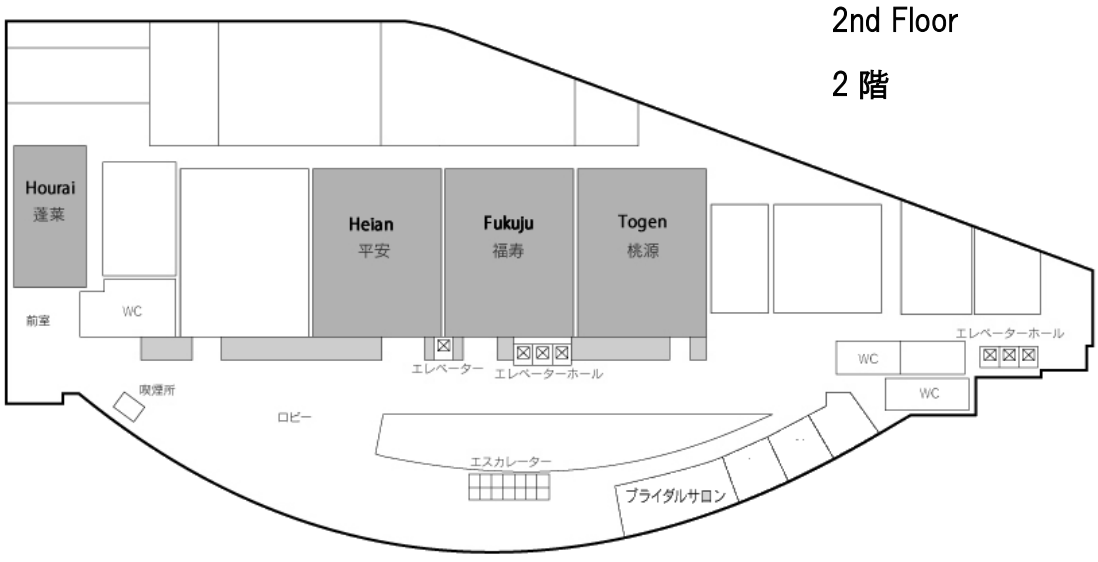
Venue

会場案内図



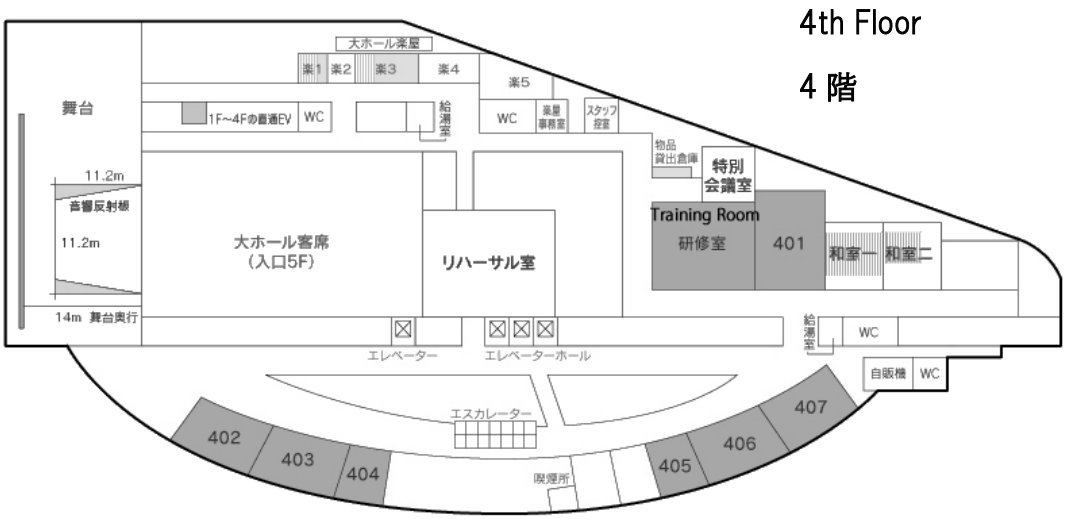
Exhibition Hall：Poster Session, Mixer

展示ホール：ポスターセッション、ミキサー



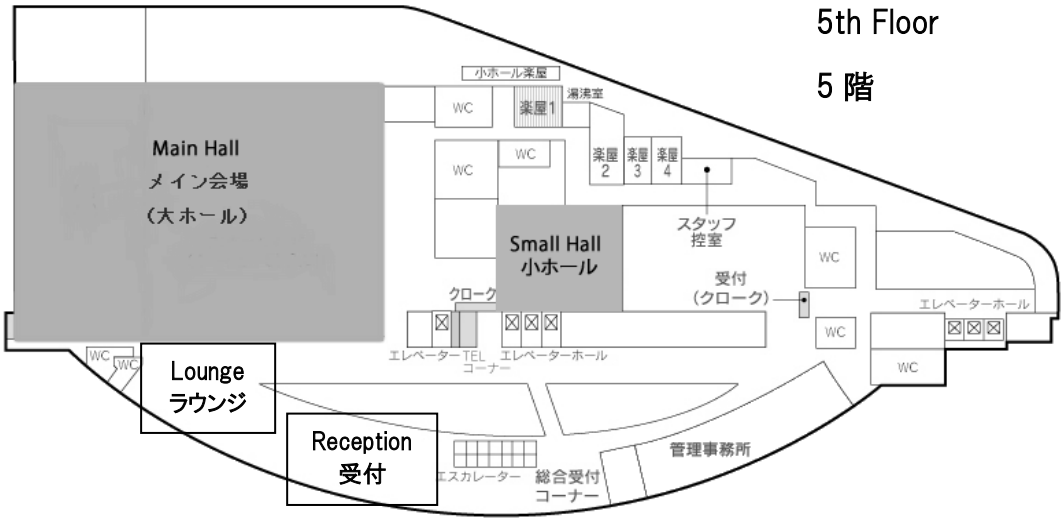
Hourai： Welcome Party
Heian： Banquet
Fukuju： Symposium, Luncheon Seminar, Sponsored Session
Togen： Luncheon Seminar

蓬莱：ウェルカムパーティ
平安：懇親会
福寿：シンポジウム、ランチョンセミナー、スポンサードセッション
桃源：シンポジウム、ランチョンセミナー、スポンサードセッション



Training Room, 401,402, 403, 406, 407：
Tutorial, Sponsored Session, Focused Session,
Organized Session, Luncheon Seminar

研修室、401、402、403、406、407：
チュートリアル、スポンサードセッション、フォーカストセッション
オーガナイズドセッション、ランチョンセミナー



Reception Desk
Main Hall : Plenary Session, Invited Talks, Symposium
Closing Remarks
Small Hall : Oral Session, Organized Session
Lounge : Exhibition Booth

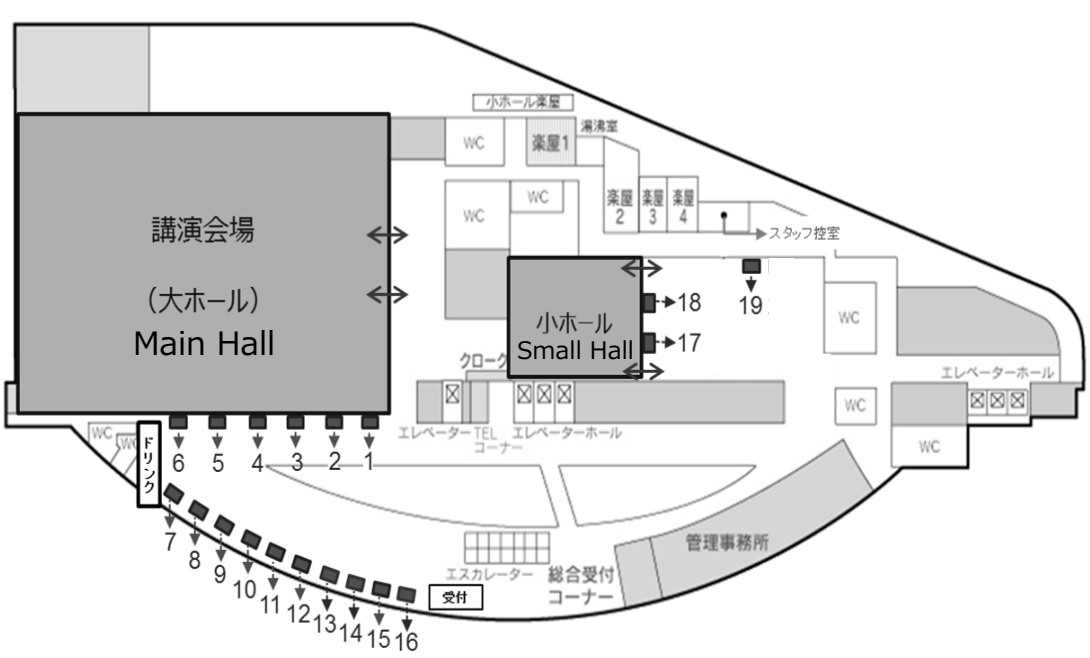
受付
大ホール：プレナリーセッション、招待講演
クロージング
小ホール：口頭発表、オーガナイズドセッション
ラウンジ：企業展示ブース

Exhibitors List
出展一覧

< Exhibition Booth><展示ブース>	Booth No.
World Fusion Co., Ltd 株式会社ワールドフュージョン	1
Thomson Reuters トムソン・ロイター	2
CONFLEX Corporation コンフレックス株式会社	3
Accelrys K.K. アクセルリス株式会社	4
SCHRÖDINGER シュレーディンガー	5
INFOCOM CORPORATION インフォコム株式会社	6
Ryoka Systems Inc. 株式会社菱化システム	7
TALOU CO.,LTD 株式会社タロウ	8
MEDICAL & BIOLOGICAL LABORATORIES CO.,LTD. 株式会社医学生物学研究所	9
Kyoto Constella Technologies Co., Ltd./ Affinity Science Corporation 株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ/ 株式会社アフィニティサイエンス	10
Kobe City HPC Cluster／ Foundation for Computational Science 神戸ＨＰＣクラスター／ＦＯＣＵＳ（計算科学振興財団）	11
iPS Academia Japan, Inc. iPS アカデミアジャパン株式会社	12
Human Genome Center, the Institute of Medical Science, The University of Tokyo 東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター	13
Japan Biological Informatics Consortium 一般社団法人 バイオ産業情報化コンソーシアム	14
Nabe International Corporation 株式会社ナベ インターナショナル	15
Life Technologies Japan Ltd,. ライフテクノロジーズジャパン株式会社	16
Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University (OIST) 沖縄科学技術大学院大学 (OIST)	17
Hitachi Solutions, Ltd. 株式会社日立ソリューションズ	18
The National Bioscience Database Center, JST/ The Database Center for Life Science, ROIS バイオサイエンスデータベースセンター,JST/ ライフサイエンス統合データベースセンター,ROIS	19

５階出展配置

5th Floor Exhibition booth



<ランチョンセミナー・スポンサードセッション・ チュートリアル・オーガナイズドセッション>	**場所**	**時間**
イルミナ株式会社（LS）	407	10 月 30 日(水) 11:30-12:30
NGS 現場の会　sponsored by 三井情報株式会社（LS）	401	10 月 31 日(木) 12:00-13:00
大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCI 戦略分野 1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム（OS）	401	10 月 31 日(木) 10:00-11:30
株式会社ジナリス（TS）	研修室	10 月 28 日(月) 16:00-18:00
株式会社椿本チエイン（LS）	福寿	10 月 31 日(木) 12:00-13:00
株式会社ＤＮＡチップ研究所（LS）	407	10 月 29 日(火) 12:00-13:00
東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター（OS）	401	10 月 29 日(火) 14:00-15:30
東北大学　東北メディカル・メガバンク機構（OS）	401	10 月 31 日(木) 13:30-15:00
トミーデジタルバイオロジー株式会社（LS）	桃源	10 月 29 日(火) 12:00-13:00
株式会社ナベ インターナショナル（LS）	福寿	10 月 29 日(火) 12:00-13:00
日本動物実験代替法学会（SS）	桃源	10 月 31 日(木) 13:30-15:00
株式会社パーキンエルマージャパン（LS）	桃源	10 月 31 日(木) 12:00-13:00
パトコア株式会社（LS）	福寿	10 月 30 日(水) 11:30-12:30
みずほ情報総研株式会社（SS）	福寿	10 月 31 日(木) 13:30-15:00
ライフサイエンス統合データベースセンター, ROIS（OS）	小ホール	10 月 31 日(木) 10:30-12:00
ライフテクノロジーズジャパン株式会社（LS）	401	10 月 29 日(火) 12:00-13:00
株式会社ワールドフュージョン（LS）	桃源	10 月 30 日(水) 11:30-12:30

LS:ランチョンセミナー

SS:スポンサードセッション

TS:チュートリアル

OS:オーガナイズドセッション

プログラム

１０月２８日（月）CBI/Omix

時間	大ホール(5F)	福寿(2F)	桃源(2F)	研修室(4F)
13:30				
16:00–18:00				チュートリアル **株式会社ジナリス** NGS データ解析入門
18:00–20:30		オープニング **ウェルカムパーティー（2F蓬莱）**		

１０月２9日（火）CBI/Omix

時間	大ホール(5F)	福寿(2F)	桃源(2F)	研修室(4F)
(JSBi/CBI) プレナリー				
10:00–11:00	**K-01 長野哲雄**（東大） 「東京大学創薬オープンイノベーションセンターの活動」			
11:00–12:00	**K-02 小原雄治**（国立遺伝研） 「バイオインフォで生命が分かるか？－生命情報科学に期待すること－」			
12:00–13:00		ランチョンセミナー **株式会社 ナベ インターナショナル** 「次世代シーケンシングデータ解析の可能性を拡げる 信頼性に優れた道具としての解析システム」	ランチョンセミナー **トミーデジタルバイオロジー 株式会社** 「Ingenuity 社Pathway 解析、 Variant 解析ソリューションのご紹介」	
13:00–14:00	ポスター発表（1F展示ホール）			
アカデミア創薬と産学連携 座長:**岡部隆義**（東大）		領域会議 新学術領域 「合成生物学」	公開シンポジウム 新学術領域 「分子ロボティクス」	
14:00–14:30	**I-01 酒井敏行**（京都府立医大） 新規MEK阻害剤trametinib及び CH5126766の発見 –「RB再活性化スクリーニング」を用いて			
14:30–15:00	**I-02 青木淳賢**（東北大） 「新規GPCR活性化測定法TGFα 切断アッセイとその応用」			
15:00–15:30	**I-03 新家一男**（産総研BIRC） 「我が国のノウハウを結集した世界最大級の天然物ライブラリーとその運用」			
15:30–16:00	ポスター発表（1F展示ホール）			
iPSおよびiNSILICOによる創薬ADMET研究の動向 座長:**水間 俊**（東薬大）		領域会議 新学術領域 「合成生物学」	公開シンポジウム 新学術領域 「分子ロボティクス」	
16:00–16:10	**水間 俊**（東薬大） 「iPSおよびiNSILICOのADMET研究への期待」			
16:10–16:50	**I-04 広野修一**（北里大） 「イン・シリコ創薬技術に基づいた代謝酵素研究の実際」			
16:50–17:30	**I-05 早乙女秀雄**（iPSアカデミアジャパン(株)） 「iPS細胞と創薬：現状と今後の展開」			
17:30–18:00	CBI学会総会	ポスター発表（1F展示ホール）・ミキサー(20:00まで)		

１０月２８日（月）		１０月２８日（月）JSBi			
402	403	時間	小ホール(5F)	401	407
		13:30–17:30		チュートリアル FMO計算実習 **FMO研究会** ―創薬研究に役立つ機能の紹介と新開発の FMO 計算支援ソフト"FU"と GAMESS を用いた計算実習―	
		18:00–20:30			

１０月２９日（火）		１０月２９日（火）JSBi			
402	403	時間	小ホール(5F)	401	407
		10:00–12:00	–	–	
CBIジャーナル編集委員会		12:00–13:00		ランチョンセミナー **ライフテクノロジーズジャパン株式会社** "Translational Cancer Genomics Solutions"	ランチョンセミナー **株式会社DNAチップ研究所** 「大量配列解析の周産期疾患への応用」
ポスター発表（1F展示ホール）		13:00–14:00	ポスター発表（1F展示ホール）		
	フォーカストセッション 「生体分子認識における構造と相互作用の制御」	14:00–15:30	ハイライトトラック(1)	オーガナイズドセッション **東京大学医科学研究所 ヒトゲノム解析センター** 「ゲノム医療の明日を切り開く ヒトゲノム解析センタースーパーコンピュータシステム」 – 東大HGCスパコンを用いた ヒトの全ゲノムシークエンス解析 （理化学研究所 **藤本明洋**） – スーパーコンピュータを利用した がんゲノムシークエンス解析 （国立がん研究センター **十時 泰**）	
ポスター発表（1F展示ホール）		15:30–16:00	ポスター発表（1F展示ホール）		
フォーカストセッション 「情報化学の生命科学応用・若手の会プレ会」		16:00–17:30	口頭発表	ハイライトトラック（2）	
ポスター発表（1F展示ホール）		17:30–18:30	ポスター発表（1F展示ホール）・ミキサー(20:00まで)		

１０月30日（水）CBI/Omix				
時間	**大ホール(5F)**	**福寿(2F)**	**桃源(2F)**	**研修室(4F)**
Emerging Hot Topics in Chem-Bio-Informatics -科学研究費補助金　新学術領域「分子ロボティクス」「合成生物学」と共催-		スポンサードセッション	スポンサードセッション	フォーカストセッション 「創薬等PF バイオインフォマティクス領域での創薬支援の紹介」
10:00-10:30	**I-06 Peng Yin** (Harvard, USA) "Programming Nucleic Acids Self-Assembly"			
10:30-11:00	**I-07 Laurent Blanchoin** (CNRS, France) "Directed actin self assembly and contractility"			
11:00-11:30	**I-08 Tim Gardner (Amyris)** "Synthetic biology at Amyris: from simple circuits to the industrial production of tires, fuels and cosmetics."			
11:30-12:30		ランチョンセミナー **パトコア株式会社** 「合成展開支援ツールCRAIS Transformerのご紹介」	ランチョンセミナー **株式会社ワールドフュージョン** 「疾患関連遺伝子からの化合物探索とPolypharmacology」	
12:30-13:30	ポスター発表（1F展示ホール）			
公共データベースの有効活用 座長:**高岡雄司**（アクセルリス）, **本間光貴**（理研）		公開国際シンポジウム 新学術領域「合成生物学」		フォーカストセッション 「フラグメント分子軌道法の最近の展開：実利用へ向けた開発と応用」
13:30-14:00	**I-09 John Overington (ChEMBL)** "ChEMBL: Open Database for Drug Discovery"			
14:00-14:30	**I-10 本間光貴**（理研） 「ChEMBLデータに基づいた置換基・骨格変換アイディア創出システム」			
14:30-15:00	**I-11 Rajiah Aldrin Denny** (Pfizer Inc.) "Selectivity and Physiochemical Properties Trends in Kinase Inhibitors"			
15:00-15:30	ポスター発表（1F展示ホール）			
15:30-16:00	**I-12 石原 司**（アステラス製薬(株)） 「多次元ADMET最適化を指向したMatched Molecular Pair探索に基づく知識共有」	領域会議 新学術領域「合成生物学」		
医薬品設計の新しい展開（低分子から中分子・高分子へ） 座長:**本間光貴**(理研)				
16:00-16:30	**I-13 広川貴次**（産総研CBRC） 「タンパク質-ペプチド相互作用の分子モデリングと低分子化へ向けて」			
16:30-17:00	**I-14 藤谷秀章**（東大先端研） 「分子動力学を用いた抗体医薬の開発」			
17:00-18:00	ポスター発表（1F展示ホール）・ミキサー(20:00まで)			
18:00-20:30		懇親会（2F 平安）		

１０月30日（水）		１０月30日（水）JSBi			
402	403	時間	小ホール(5F)	401	407
		10:00–11:30	–	キャリアセッション 10:00–10:10 趣意説明 京都大学 化学研究所 **阿久津達也** 大阪大学大学院 情報科学研究科 **松田秀雄** 10:10–10:35 講演1 株式会社プリファードインフラストラクチャー **大野健太** 「次世代バイオインフォマティクスを支える技術」 10:35–11:00 講演2 アメリエフ株式会社 **山口昌雄** 「日進月歩の生命科学研究で 成果を出し続けるためには」 11:00–11:10 質疑応答	
		11:30–12:30			ランチョンセミナー **イルミナ株式会社** 「イルミナ次世代シーケンサー アップデートと臨床応用への課題」
ポスター発表（1F展示ホール）		12:30–13:30	ポスター発表（1F展示ホール）		
	フォーカストセッション 「オミックス解析における実務者意見交換会」	13:30–15:00	口頭発表	13:30–13:55 講演3 三井情報株式会社 **奥村利幸** 「MKIのチャレンジーバイオインフォマティクスが拓く未来に向けて」 13:55–14:20 講演4 株式会社CLCバイオジャパン **宮本真理** 「外資系企業が博士号取得者へ期待すること、外資系企業で活躍する博士号取得者達」 14:20–14:45 講演5 (株)インテック **小森 隆** 「バイオインフォマティクス人材の総合IT企業におけるキャリアパス」 14:45–15:00 質疑応答	
ポスター発表（1F展示ホール）		15:00–15:30	ポスター発表（1F展示ホール）		
フォーカストセッション「医薬品開発におけるトランスレーショナル・リサーチの強化とその戦略」		15:30–17:00	口頭発表	15:30–15:55 講演6 塩野義製薬株式会社 **六嶋正知** 「塩野義製薬の研究所がバイオインフォマティシャンに期待すること」 15:55–16:20 講演7 エーザイ株式会社 **青島 健** 「創薬に必要なバイオインフォマティクス技術」 16:20–16:45 講演8 中外製薬株式会社 **水野英明** 「製薬企業研究員のキャリアパス」 16:45–17:00 質疑応答	
CBI学会 ポスター選考委員会	ポスター発表 （1F展示ホール）	17:00–18:00	ポスター発表（1F展示ホール）・ミキサー(20:00まで)		
		18:00–20:30			

１０月31日（木）CBI/Omix				
時間	大ホール(5F)	福寿(2F)	桃源(2F)	研修室(4F)
ドラッグリポジショニング 座長:**水島 徹**（慶應大薬）		領域会議 新学術領域 「合成生物学」	公開シンポジウム 新学術領域 「分子ロボティクス」	「皿井先生のメモリアル集会」
10:00-10:30	**I-15 水島 徹**（慶應大薬） 「ドラッグリポジショニングの現状と展望」			
10:30-11:00	**I-16 夏目 徹**（産総研MolProf） 「分子プロファイリングから展開するDR」			
11:00-11:30	**I-17 塩村 仁**（ノーベルファーマ(株)） 「医薬品開発の今後－アンメットニーズ医薬品開発とDRへの期待－」			
11:30-12:00	ポスター賞授与式			
12:00-13:00		ランチョンセミナー **株式会社椿本チエイン** 「小型低温自動倉庫（つばきラボストッカ ミニ）および超低温要素技術のご紹介」	ランチョンセミナー **株式会社** **パーキンエルマージャパン** 「既存薬・計算化学・創薬・受託サービスの世界を紹介」	オミックス医療研究会
13:00-13:30	ポスター発表（1F展示ホール）			
(Omix) シンポジウム 日本経済の東南アジアへのシフト:高病原性鳥インフルエン ザの感染拡大阻止にむけて オーガナイザー:**石川智久**（理研OSC）		スポンサードセッション **みずほ情報総研株式会社** 「In silico 創薬へのFMO法の活用：MIZUHO/BioStationの最新機能と解析事例」	スポンサードセッション **日本動物実験代替法学会** シンポジウム 「in vitro試験と代替法をつなぐ計算毒性学の立ち上げ」	フォーカストセッション 「化合物ライブラリー構築」
13:30-14:00	**永井美之（理研CRNID）** 「感染症国際共同研究の新しい形:J-GRID」			
14:00-14:30	**朴 三用**（横浜市立大） 「インフルエンザRNAポリメラーゼの構造による新規抗ウイルス剤の探索」			
14:30-15:00	**石川智久**（理研OSC） 「高病原性鳥インフルエンザH5N1の迅速検出法と新規治療法の臨床応用」			
15:00-15:30				
(Omix)パーソナル化するオミックス医療 オーガナイザー: **村松正明**（東医歯大）				フォーカストセッション **第6回FMO研究会** 「FMO法の創薬への適応例とその展望」
15:30-15:40	**村松正明**（東医歯大） 「はじめに」			
15:40-16:05	**荒川和晴**（慶應大） 「パーソナルゲノム時代のリテラシー教育」			
16:05-16:30	**山崎義光**（(株)サインポスト） 「多項目遺伝子検査をもちいた生活習慣病予防プログラムとその生活習慣改善効果」			
16:30-17:00	**荻島創一**（東北大） 「東北メディカル・メガバンク事業におけるゲノム・オミックス情報と医療情報等の統合」			
17:00-17:30	クロージング			

<table>
<tr><th colspan="2">１０月31日（木）</th><th colspan="3">１０月31日（木）JSBi</th></tr>
<tr><th>402</th><th>403</th><th>時間</th><th>小ホール(5F)</th><th>401</th></tr>
<tr><td rowspan="2"></td><td rowspan="2"></td><td>10:00–10:30</td><td></td><td rowspan="2">オーガナイズドセッション
「京速スーパーコンピューティングと創薬」
オーガナイザー 田中正夫、坂田恒昭
（大阪大学大学院基礎工学研究科
HPCI戦略分野1教育プログラム）
10:05–10:30
「製薬コンソーシアムで挑むスパコン創薬」
京都大学大学院薬学研究科 システム創薬科学教授 奥野恭史
10:30–10:55
「インシリコ創薬に向けた標的タンパク質モデリングからの
アプローチ」
三井情報株式会社 R&Dセンター バイオサイエンス室 佐藤美和
10:55–11:20
「創薬の現場からみたスーパーコンピューティングと計算化学」
塩野義製薬株式会社 創薬・探索研究所 創薬化学部門長
辻下英樹</td></tr>
<tr><td>10:30–12:00</td><td>オーガナイズドセッション
ライフサイエンス
統合データベースセンター

″Open Science Award & BioHack Competition″</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>12:00–13:00</td><td>–</td><td>ランチョンセミナー
NGS現場の会/三井情報株式会社
「次世代医療を支える大規模シーケンシングとインフォマティクス」</td></tr>
<tr><td colspan="2">ポスター発表（1F展示ホール）</td><td>13:00–13:30</td><td colspan="2">ポスター発表（1F展示ホール）</td></tr>
<tr><td>フォーカストセッション
「第一原理計算とメタボロミクス：予測と実証」</td><td>フォーカストセッション
「インシリコ創薬」</td><td>13:30–15:00</td><td>口頭発表</td><td>オーガナイズドセッション
東北大学　東北メディカル・メガバンク機構(TOMMO)
「動き出した大規模ゲノムコホート計画：
東北メディカル・メガバンクの挑戦的ゲノム研究」

13:30–13:35 初めに
TOMMO ゲノム解析部門 准教授 山下理宇

14:00–14:25 東北メディカルメガバンクの目指すものと
全東北人1000人参照ゲノム計画
TOMMO ゲノム解析部門 教授 安田 純

14:25–14:50 全東北人1000人参照ゲノム計画関連の
インシリコ解析の状況とバイオインフォマティクス
TOMMO ゲノム解析部門 教授 長崎正朗

14:25–14:50 新しい統合データベースとしてのバイオバンク開発
TOMMO 医療情報ICT部門 准教授 高井貴子

14:50–15:00 総合討論&次年度の生命医薬情報学連合大会の案内</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>15:00–15:30</td><td>ポスター賞授与式/ Oxford Journal – JSBi Prize 授与式</td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>15:30–17:00</td><td>–</td><td>–</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>17:00–17:30</td><td></td><td></td></tr>
</table>

基調講演

特別セッション

K-01

東京大学創薬オープンイノベーションセンターの活動
Activities of Open Innovation Center for Drug Discovery

長野　哲雄
Tetsuo Nagano

東京大学創薬オープンイノベーションセンター
Open Innovation Center for Drug Discovery (OCDD), The University of Tokyo

合成低分子化合物による生体機能の制御法は RNAi あるいはノックアウト動物の作出に匹敵する重要な技術である。そのような機能性化合物は、新薬にもつながることからも注目される。しかしながら大学・国研等の公的研究機関においては本物の機能性低分子化合物を創出するための基盤となる大型の設備が整備されておらず、日本においてこのような化合物を偶然の発見を除き基本的に創出することは不可能であった。大型基盤設備とは、具体的には 20 万を超える化合物ライブラリーあるいは HTS などである。種々の準備を経て、このような大型設備が 2012 年 4 月に東京大学に設置され、全国の創薬を志す先生方の共用施設として利用されるようになった。同時に製薬企業の研究者による研究支援体制も構築されており、日本における創薬研究が本格的に始動している。講演ではこの現状と今後の展開について紹介する。

The development of a useful "synthetic small molecular compound regulating a biological function" has possibility to be equal to RNAi or knockout animal technology which is innovative in life science study and these useful compounds are now trying to be produced by researchers in the field of Medicinal Chemistry. Medicinal chemists could elucidate biological system with chemical techniques, which leads to drug discovery research in academia. However, it should be much difficult for medicinal chemists to produce new practical drugs for clinical medicine, because there are not any infrastructures, such as a public chemical library and high-throughput screening equipments, indispensable for drug discovery. Recently, we have established Open Innovation Center for Drug Discovery (OCDD), University of Tokyo, equipped with these infrastructures. The infrastructures should strongly promote academia drug discovery. I would like to introduce OCDD, University of Tokyo.

References
1) “Screening and X-Ray Crystal Structure-based Optimization of Autotaxin (ENPP2) Inhibitors, Using a Newly Developed Fluorescence Probe” Mitsuyoshi Kawaguchi, Takayoshi Okabe, Shinichi Okudaira, Hiroshi Nishimatsu, Ryuichiro Ishitani, Hirotatsu Kojima, Osamu Nureki, Junken Aoki and Tetsuo Nagano, *ACS Chem. Biol.*, 8, 1713-1721（2013）.
2) “Blockade of Inflammatory Responses by a Small-Molecule Inhibitor of the Rac Activator DOCK2” Akihiko Nishikimi, Takehito Uruno, Xuefeng Duan, Qinhong Cao, Yuji Okamura, Takashi Saitoh, Nae Saitoh, Shunsuke Sakaoka, Yao Du, Atsushi Suenaga, Mutsuko Kukimoto-Niino, Kei Miyano, Kazuhito Gotoh, Takayoshi Okabe, Fumiyuki Sanematsu, Yoshihiko Tanaka, Hideki Sumimoto, Teruki Honma, Shigeyuki Yokoyama, Tetsuo Nagano, Daisuke Kohda, Motomu Kanai and Yoshinori Fukui, *Chem. & Biol.*, 19, 488-497 (2012).

K-02

バイオインフォで生命が分かるか？ー生命情報科学に期待すること一
What is necessary to understand life in the big-data era?

小原雄治
Yuji Kohara

情報・システム研究機構　国立遺伝学研究所
National Institute of Genetics, Research Organization of Information and Systems

ビッグデータの時代である。バイオインフォマティックスで生命を理解するためには何が重要なのか、課題を議論してみたい。

1）実験科学とのバランス：私が所属する機構では今年度から「データ中心科学リサーチコモンズ事業」が始まり、生命、地球、社会、経済などの複雑なシステムの解明をビッグデータ解析から取り組むことになっている。このことは必然でもあるが、生命とそもそも「実験」が難しい他の分野では様相が異なるようにも思う。従来のパラダイムである実験科学／仮説駆動科学を離れては生命理解はおぼつかない。どのようなバランスで進めるのがよいだろうか？

2）進化・歴史性の問題：生命の問題は、それがどのようなメカニズムであるのか、どのようにしてできてきたのか、という二つの面があるが、ある意味これは不可分である。生命はその情報をゲノム DNA に蓄え、それが絶妙の頻度で変化し、その場その場の環境変動を潜り抜けたものが残ってきた。しかしこのような積み重ねだけでうまい適応構造ができるとも思えない。このためによくあるのが使いまわしである。ある環境に適応してできてきたメカニズムが、少し変化することで他の環境にも適応できるような場合である。進化は実験ができない。どのようにこの問題を解けるだろうか？

3）少数性の問題：細胞を考えた場合、遺伝子／ゲノムは 1 分子でこなしている。それを読み取るポリメラーゼの数も限られている。mRNA 数も大小はあるが、細胞あたり平均 1 分子以下でも意味があるとの結果もある。とても酵素反応式が適用できるとは思えないし、このような少数の分子で再現性・ロバスト性を示すことは驚くべきことだと思う。その仕組みをどう解くのか？

Now is the big-data era. I would like to discuss about important things for bioinformatics towards understanding of life.

1) In a project of my organization, data centric approach is now applied to various field including the sciences of life, earth and human society. Unlike the other fields in which experiments are difficult, life science still need the current paradigm of experimental approach / hypothesis driven approach, without which it is difficult to understand life. How should we balance the two approaches?

2) Our goal is to understand the mechanisms of life, but these were not designed but have been made up through evolution: information of life mechanisms is stored in genome DNA and it has changed by chance over time. Some of changed ones have adapted to environmental changes and survived. The current mechanism of life is such a historical result. How can we approach this evolution process?

3) Elementary process of life is operated by a surprisingly small number of molecules. For example, a gene or genome is working at a single molecule, the number of RNA polymerase in a cell is limited, but the cell shows reproducibility and robustness. In such conditions the conventional enzyme reaction formula can not be applied. How can we approach this issue?

皿井先生のメモリアル集会
Professor Akinori Sarai Memorial

日時：　2013 年 10 月 31 日　10：00～11：30
場所：　研修室（４F）

開催趣旨：

皿井明倫先生（九州工業大学・名誉教授）が本年７月に急逝されました。皿井先生は、米国 NIH において、ラムダファージ Cro リプレッサーの生物物理学的研究を行われた後、理化学研究所（筑波）において、動物細胞の転写因子 Myb などの構造研究を行い、転写因子構造研究の黎明期を牽引されました。さらに、立体構造に基づく、より広範なゲノムワイドな転写因子研究を行って来られました。そして、九州工業大学に移られた後には、学生の教育にも力を注がれ、「ネットを通じた英語による Bioinformatics オープン教育」などにも関わって来られました。この間、多くの研究者との共同研究を通じて、この分野の研究を支えて来られました。皿井先生の人柄は、非常に控えめで、それでいて非常にしっかりとした科学的な見解を持っておられ、静かな一言一言が非常に重みを持って、我々に伝わるという印象がありました。本年３月に九州工業大学を退職後も、科研費の新学術領域研究のメンバーとして、活躍をされていましたが、残念ながら７月に急逝されました。ここに、皿井先生のお人柄を偲び、お仕事を振り返るため、本集会を企画しました。多くの方々がご参集くださることを願っております。

モデレーター：
石井俊輔　Shunsuke Ishii（理化学研究所　RIKEN）
神沼二眞　Tsuguchika Kaminuma（サイバー絆研究所 Institute for Cyber Associates）

1. 転写因子構造研究の黎明期と皿井先生
　　石井俊輔（理化学研究所）

2. 米国時代の思い出
　　宮澤三造（群馬大学）

3. 転写分野でドライ研究からウェット研究まで横断的に活躍された皿井先生
　　緒方一博（横浜市立大学）

4. 立体構造から探るタンパク質-DNA 認識機構
　　河野秀俊（日本原子力研究開発機構）

5. ネットによるバイオインフォマティクス講義の配信
　　神沼二眞（サイバー絆研究所）

CBI 学会大会

＜招待講演＞

＜Invited Talks＞

I-01

新規 MEK 阻害剤 trametinib 及び CH5126766 の発見−「RB 再活性化スクリーニング」を用いて

Discovery of novel MEK inhibitors trametinib and CH5126766- Using “RB-reactivating screening”

酒井 敏行
Toshiyuki Sakai

京都府立医科大学大学院医学研究科分子標的癌予防医学
Department of Molecular-Targeting Cancer Prevention,
Kyoto Prefectural University of Medicine

癌の分子標的薬のスクリーニングは一般的には、目的分子の活性部位のペプチドに結合する物質を cell free でスクリーニングする系を用いることが多い。確かにこの方法で良い分子標的薬が得られることもあるが、分子の種々の場所に結合することにより allosteric でユニークな阻害剤を見出すことはできない。そこで私達は、種々の分子標的薬が最終的に RB をタンパク質レベルで再活性化することに着目し、 RB を再活性化させる薬剤を網羅的にスクリーニングすることによる cell-based assay を行うことにした。具体的には、 RB タンパク質を活性化型にする CDK 阻害因子の p15 や p27 を誘導する物質をスクリーニングすることにより、JT 医薬総合研究所と新規 MEK 阻害剤 trametinib を見出し、さらに中外製薬と新規 RAF/MEK 阻害剤 CH5126766 を見出した。trametinib は進行性 BRAF 変異メラノーマ患者に対する初めての MEK 阻害剤として Mekinist の商品名で今年の 5 月に米国で認可され、CH5126766 は現在臨床試験第一相が行われている。今回はこれらの開発の経緯を紹介させていただきたい。

Screening for molecular-targeting agents for cancer is generally performed by cell-free assays, only detecting agents binding to the active sites of the molecules. In contrast, we thought out that cell-based “RB-reactivating screening” could be useful for discovery of allosteric and unique agents binding to any portions of the target molecules. We then performed the screening of agents up-regulating RB-reactivating cdk inhibitors, p15 and p27 with JT Pharmaceutical Institute and Chugai Pharmaceutical Co. As the results, we discovered a novel MEK inhibitor trametinib and a novel RAF/MEK inhibitor CH5126766. Trametinib was approved in US for patients with advanced BRAF mutated melanoma and CH5126766 is under Phase 1 trial. I will briefly show how these agents were discovered and developed.

I-02

新規 GPCR 活性化測定法 TGFα切断アッセイとその応用
TGFα shedding assay and its application
–A novel method for detecting GPCR activation–

青木 淳賢
Junken Aoki

東北大学大学院薬学研究科
Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Tohoku University

我々は、新規 GPCR の活性化測定法 TGFα切断アッセイを開発した。本アッセイは GPCR の活性化を最終的に、膜結合型タンパク質である TGFαの切り出しで評価するものである。デフォルトでは Gαq あるいは Gα12/13 に共役する GPCR に有効である。特に、従来検出が比較的困難であった Gα12/13 シグナルを効率よく検出可能である。また、G タンパク質のシグナルを変換するキメラ G タンパク質の利用により Gαi や Gαs の活性化も検出でき、試したリガンド既知の GPCR 111 種中実に 99 種類の GPCR の活性化を検出できた。本法は非常に再現性の高く、検出のぶれがない方法である。また、カルシウム指示薬やルシフェラーゼを測定するための特別な機器は必要とせず、GPCR になじみのない研究者も簡単に導入できる手法である。

本発表では、TGFα切断アッセイを開発した経緯、さらには、本法応用例として、オーファン GPCR のリガンド同定と HTS の例を紹介したい。

We recently developed a novel method for detecting activation of G protein-coupled receptors (GPCRs). This method is based on ectodomain shedding of Transforming Growth Factor α (TGFα) downstream of GPCR signaling. In this method is useful for Gαq and Gα12/13-coupling GPCRs. It is noted that this method is applicable to Gα12/13-coupling GPCRs, which have been difficult to detect. Using chimeric GPCRs the method is applicable for detecting Gαi and Gαs signaling. Indeed we could detect activation of 99 GPCRs out of 111. The method does not need special instruments and expensive reagent such as Ca^{2+} indicators and substrates for luciferase. In this talk I will present how and why we developed the assay and also application of the method to de-orphaning GPCRs.

I-03

我が国のノウハウを結集した世界最大級の天然物ライブラリーとその運用
The world-largest natural library which involves the know-how of Japan, and its application to various screenings

新家　一男
Kazuo Shin-ya

産業技術総合研究所　バイオメディカル研究部門
Biomedical Research Institute,
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

天然物は人智の及ばない構造を有する化合物を多数存在し、抗菌、抗腫瘍あるいは免疫抑制剤など多くの医薬品、あるいは農薬として応用されている。また、天然物化学は日本が世界をリードして来た分野であり、技術、知識および材料など世界を圧倒するバックグラウンドを持つ。各社の天然物ライブラリーは、独自の創意工夫の元、開発されてきたものであり、これまで門外不出のものであった。しかしながら、現在のハイスループットスクリーニング系には不向きであること、またヒット後活性物質の単離精製・構造同定を行わなければならず非効率的であるなど、必ずしも現在の創薬スクリーニングに適合しているとは言えないことも事実である。そこで我々は、次世代天然物化学技術研究組合を設立し、我が国の有数の企業が持つノウハウが詰まった天然物ライブラリーを集結し、相互利用すると共に、誰もが一定条件下でスクリーニングに利用できるシステムを確立した。これにより、天然物の持つ魅力を大きく引き出すことが期待される。

There are many natural compounds of which structures are cannot be imagined by human being.　They have been employed as screening library and many clinical drugs such as antibacterial properties, an anti-tumor, or an immunosuppressant, or agricultural chemicals have been developed from natural library.　Natural chemistry is the field which Japan has led the world, and Japan has a background such as technology, knowledge and materials, which overwhelms the worlds.　Each companies has developed their natural library under own originality and creativity, thus, their library was considered as much-treasured one until now.

Contrary to the unique and high activities, natural library is not always applicable for high through-put screenings, and active compounds have to be isolated from crude extracts and identified their structures.　Thus, it is a fact that natural library is not necessarily a suitable source for drug developments. Therefore, we established Technology Research Association for Next-Generation Natural Product Chemistry to utilize natural library provided by companies mutually and open for everyone under a lowered-level agreements.　It is expected that this system allows to draw the charm of natural products effectively.

I-04

イン・シリコ創薬技術に基づいた代謝酵素研究の実際
Practical studies on CYP enzymes using *in silico* drug discovery techniques

広野修一
Shuichi Hirono

北里大学薬学部
School of Pharmaceutical Sciences, Kitasato University

Cytochrome P450 (CYP) は約 90%の医薬品の代謝に関与しており, 種別に見ると CYP1A2 (4%), 2A6 (2%), 2C9 (10%), 2C19 (2%), 2E1 (2%), 2D6 (30%), 3A4 (50%) となり, CYP2D6 と CYP3A4 が医薬品の代謝における主要な酵素であることがわかる。

CYP2D6 に関して, 遺伝子多型が多く知られており, CYP2D6.17(T107I / R296C / S486T) は, *in vitro* 酵素実験系及び臨床系において活性プロファイルが変わり, 多くの場合は CYP2D6.1 (野生体型) よりも代謝能が減弱する。本研究では, CYP2D6.1 と CYP2D6.17 の阻害活性差異を生み出す要因を調べるために, MD シミュレーションとコンピュータリガンドドッキングにより野生型と変異型のタンパク質立体構造及びそれらに対する様々な医薬品の結合様式を解析した。

CYP3A4 に関しては, コンピュータリガンドドッキングから生成した分子アラインメントに基づく Comparative Molecular Field Analysis (Structure-based CoMFA)を行い, CYP3A4 阻害剤の３次元定量的構造活性相関(3D-QSAR)モデルを作成し, 医薬品候補化合物に関する精度の高い CYP3A4 阻害活性予測式を得た。

Cytochrome P450 (CYP) enzymes play an important role in the metabolism of many species. The molecules metabolized by CYP are not only endogenous small molecules but also exogenous bioactive compounds such as drugs. Among the many CYP family members, CYP3A4 and CYP2D6 are ones of the most important enzymes because about 80% of marketed drugs are metabolized by CYP3A4 and CYP2D6. The CYP2D6.17 (natural variant) that is expanded to the Africans has three amino acid exchanges (T107I/R296C/S486T) from CYP2D6.1 (wild type). It is well known that the ligand preference of CYP2D6.17 is different from CYP2D6.1. From ICH-E5 guideline, it is very important to estimate whether the medicine has sensitivity on the ethnic group to judge the acceptability of the foreign clinical data. In this study, we investigated the inhibition potency difference of drugs between CYP2D6.1 and CYP2D6.17. As a result, we could predict the inhibition potency of drugs against CYP2D6.1 and CYP2D6.17 by the regression equations obtained from the receptors sampling based on the MD simulation, computer-ligand docking, and the calculation of biding free energy with MM-GB/SA methods. We also constructed 3D-QSAR models using structure-based Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA) in order to predict and compare the human and rat CYP3A family inhibition potency against various compounds.

I-05

iPS 細胞と創薬:現状と今後の展開
Status and Future Development of iPSC and the Drug Discovery

早乙女　秀雄
Hideo Saotome

iPS アカデミアジャパン（株）
iPS Academia Japan, Inc.

低分子薬による治す創薬、タンパク質による作る創薬、2006 年山中先生 iPS 細胞発見により、本格的な細胞の治療への応用と創薬の根本的な手法の変革の時代に突入している。今回は、iPS 細胞より分化誘導された，心筋細胞、神経細胞、肝臓細胞等の創薬応用の現状と克服しなければならない問題点等の取り組みをご紹介させて頂きます。

We have been discovered a treatment drug by small molecule and a generate treatment drug by protein. We now face era of innovative change of drug discovery by cells induced and derived from iPSC which are discover by Dr. Yamanaka in 2006. The situation of applied researches of iPSC derived cells such as cardiomyocytes, neurons, hepatocytes etc., for drug discovery and the key issues will be introduced in this session.

I-06

Programming Nucleic Acids Self-Assembly

Peng Yin

Wyss Institute for Biologically Inspired Engineering,
CLSB 5th Floor, 3 Blackfan Circle, Boston, MA 02115, USA

Keywords: DNA nanostructure, catalytic circuits, triggered assembly, autonomous locomotion

I will discuss my lab's (http://molsys.net) research on engineering synthetic, nucleic acid-based nanostructures and applications. We have recently invented a general framework for programming the self-assembly of short synthetic nucleic acid strands into prescribed target shapes or demonstrating their prescribed dynamic behavior. Using short DNA strands, we have demonstrated the modular construction of sophisticated 2D (Nature, 485:623-626, 2012) and 3D (Science, 338:1177-1183, 2012) structures on the 100-nanometer scale with nanometer precision. Using reconfigurable DNA hairpins, we have demonstrated diverse, dynamic behavior such as catalytic circuits, triggered assembly, and autonomous locomotion (Nature, 451:318, 2008). By interfacing these synthetic, nucleic acid nanostructures with functional molecules, we are developing a diverse range of applications. In biosensing, we have constructed robust and specific probes for detecting single-base changes in a single-stranded DNA/RNA target (Nat. Chem. 4:208-214, 2012). In bioimaging, we have engineered geometrically encoded fluorescent barcodes for highly multiplexed single-molecule imaging (Nat. Chem., 4:832-839, 2012). In nanofabrication, we have developed a versatile framework for producing inorganic materials (e.g. graphene [Nat. Communications, 4:1663, 2013], silicon dioxide [JACS, 135:6778, 2013], silver, gold) with arbitrarily prescribed nanometer scale shapes. Finally, I'll discuss our ongoing work to move the nanostructures from test tubes to living cells.

[1] Wei, B., Dai, M., and Yin, P., Complex shapes self-assembled from single-stranded DNA tiles, *Nature*, 485:623-626, 2012.
[2] Ke, Y., Ong, L. L., Shih, W. M., and Yin, P., Three-Dimensional Structures Self-Assembled from DNA Bricks, *Science*, 338:1177-1183, 2012.
[3] Yin, P., Choi, H. M. T., Calvert, C. R., and Pierce, N. A., Programming biomolecular self-assembly pathways, *Nature*, 451:318, 2008.
[4] Zhang, D. Y., Chen, S. X., and Yin, P., Optimizing the specificity of nucleic acid hybridization, *Nat. Chem.* 4:208-214, 2012.
[5] Lin, C., Jungmann, A. M., Leifer, A. M., Li, C., Levner, D., Church, G. M., Shih, W. M., Yin, P., Submicrometre geometrically encoded fluorescent barcodes self-assembled from DNA, *Nat. Chem.*, 4:832-839, 2012.
[6] Jin, Z., Sun, W., Ke, Y., Shih, CJ., Paulus, G. L. C., Wang, Q. H., Mu, B., Yin, P., and Strano, M. S., Metallized DNA nanolithography for encoding and transferring spatial information for graphene patterning, Nat. Communications, 4:1663, 2013.
[7] Surwade, S. P., Zhou, F., Wei, B., Sun, W., Powell, A., O'Donnell, C., Yin, P., Liu, H., Nanoscale Growth and Patterning of Inorganic Oxides Using DNA Nanostructure Templates, *JACS*, 135:6778, 2013.

I-07

Directed actin self assembly and contractility

Laurent Blanchoin

Institute of life science research and technologies (iRTSV), Grenoble, FRANCE

Keywords: Cytoskeleton, actin, contractility, electrical connections

The organization of actin filaments into higher-ordered structures governs eukaryotic cell shape and movement. Global actin network size and architecture is maintained in a dynamic steady-state through regulated assembly and disassembly. We have developed a micropatterning method that enables the spatial control of actin nucleation sites for in vitro assays (Reymann, Nat. Mat, 2010). These actin templates were used to evaluate the response of oriented actin structures to myosin-induced contractility. We determine that myosins selectively contract and disassemble anti-parallel actin structures while parallel actin bundles remain unaffected. In addition, the local distribution of nucleation sites and the resulting orientation of actin filaments regulate the scalability of the contraction process. This "orientation selection" mechanism for selective contraction and disassembly reveals how the dynamics of the cellular actin cytoskeleton is spatially controlled by actomyosin contractility (Reymann et al., Science, 2012). Further application of the micropatterning method will be presented in particular recent data on the reconstitution of a lamellipodium-type of actin organization and the fabrication of three-dimensional electrical connections by means of directed actin self-organization (Galland et al., Nat. Mat., 2013).

[1] Reymann AC, Martiel JL, Cambier T, Blanchoin L, Boujemaa-Paterski R, Théry M. (2010) Nucleation geometry governs ordered actin networks structures. *Nat Mater.* (2010) 9: 827-32.

[2] Reymann AC, Boujemaa-Paterski R, Martiel JL, Guérin C, Cao W, Chin HF, De La Cruz EM, Théry M, Blanchoin L. (2012) Actin network architecture can determine myosin motor activity. *Science.* 336: 1310-4.

[3] Galland R, Leduc P, Guérin C, Peyrade D, Blanchoin L, Théry M. (2013) Fabrication of three-dimensional electrical connections by means of directed actin self-organization. *Nat. Mater.12:* 416-21.

I-08

Synthetic biology at Amyris: from simple circuits to the industrial production of tires, fuels and cosmetics.

Tim Gardner

Vice President of Research Programs, Amyris
Chem-Bio Informatics Society, Tokyo, Japan

Amyris has transformed ethanologenic baker's yeast into farnesene oil producers. Farnesene is a 15-carbon hydrocarbon derived from the sterol synthesis pathway (the same root pathway that make cholesterol). Its branched structure makes it ideal for processing into base-oils for cosmetics (replacing shark liver oil), synthetic engine lubricants, diesel fuel, and high-performing polymers for tires. In four years, Amyris has improved its yeast from producing only a single microliter in a test tube, to making thousands of liters in a full-scale fermentations at unprecedented yields and productivities. I will share lessons learned from the ups and downs at Amyris, and how those lessons might be applied to accelerate and empower research in Synthetic and Systems Biology.

I-09

ChEMBL - Open Data for Drug Discovery

John Overington

The European Bioinformatics Institute(ChEMBL),
The European Molecular Biology Laboratory (EMBL)

The link between the biological and chemical worlds is of central importance in many fields, not least that of healthcare and risk assessment. A major focus in the integrative understanding of biology are genes/proteins and the networks and pathways describing their interactions and functions; similarly, within chemistry there is much interest in efficiently identifying drug-like cell-penetrant compounds that specifically interact with these targets. However there has been relatively little research explicitly directed at understanding the linkages between these two domains. Key to our work in this area has been the construction of a large and general database linking pharmacological activities of compounds through to their targets in an Open Database ChEMBL (http://www.ebi.ac.uk/chembl). Key to this was the development of a series of informatics approaches to efficiently curate and normalise the data, allowing far higher integration and comparison of the original inaccessible and cryptic literature data. One application of the data is to predict the polypharmacology of a given compound based on analysis of compound set target associations. The scope and contents of the database will be presented, alongside some application of the data to understand target modulation in complex biosystems.

I-10

ChEMBL データに基づいた置換基・骨格変換アイディア創出システム
Idea generator for R-group/scaffold replacement based on ChEMBL data

本間 光貴
Teruki Honma

理化学研究所　制御分子設計研究チーム
Structure-based Molecular Design Team, RIKEN

創薬のプロセスにおいて難易度が高い段階として、ヒット化合物からリード化合物へ展開する段階（hit to lead）が挙げられる。この段階の成功率は、およそ 25%と言われている。ただ、難易度が高い半面、物量が物を言うリード最適化の段階とは違い、創薬化学者、計算化学者の能力次第では、少人数でかなり効率的に進めることが可能な段階とも言える。Hit to lead を効率的に進めるためには、大きく 2 つの要素がある。置換基や骨格の変換アイディアを創出する部分と、アイディアの妥当性を活性予測モデルなどで予測する部分である。後者に関しては、様々な手法がすでに提案され、状況に応じて使用することによって効率化に寄与している。しかし、前者のアイディア創出部分については、合成が容易な試薬リストや個々の研究者の過去の経験などから合成候補構造を選ぶ場合が多く、妥当でかつ網羅的なリストを作成する良い方法が無いのが現状である。我々は、ChEMBL データベースから置換基・骨格の変換ペアデータを網羅的に抽出し、それに対する検索と統計解析によって置換基・骨格変換のアイディアを創出するシステムを開発している。当日は、このシステムの全体像と、開発の進捗状況について紹介する。

“Hit to lead” is one of the most difficult stages in drug discovery process. Success rate of “hit to lead” is roughly 25% in pharmaceutical industry. To efficiently drive the “hit to lead” stage, there are two important factors. First is idea generation of new R-group or scaffold and second is accurate prediction for potency/ADMET profile of the new synthetic candidates. In terms of the prediction, various prediction methods have been already proposed and many case studies were reported. In contrast, efficient methods for idea generation are not well developed; even now medicinal chemists often select new synthetic candidates from commercially available reagents or structures with successful experience. Now we are developing new idea generation supporting system based on R-group/scaffold replacement pair database extracted from ChEMBL data. The overview of the whole system including future plans and recent progress will be introduced.

I-11

Selectivity and Physiochemical Properties Trends in Kinase Inhibitors

Rajiah Aldrin Denny

Global R&D, Pfizer Inc
200 Cambridgepark Drive, Cambridge, MA 02140

Kinase drug discovery remains an area of significant interest in the pharmaceutical industry. Right now there are about 15 small molecule drugs approved by FDA and are in the market. Though, in general, potency is not a major hurdle for most of the kinase inhibitor programs, promiscuosity, efficacy and toxicity are a concern. We have performed detailed analysis of external (drugs and clinical candidates) and internal kinase inhibitors spanning diverse structural classes. This talk will first highlight how the physiochemical properties vary between the marketed drugs to current clinical compounds. Then an analyzes of the Invitrogen and Dundee screening panel data for selectivity trends (or lack there off) in kinase inhibitors will be presented. Followed by structural and physiochemical features of nonselective compounds will be discussed. This talk finally focus on key questions like, whether potency is inversely correlation to selectivity? Whether clogp discriminates promiscuous compounds? Increasing MW, LogD, HBA, HBD, Fsp3 and RotBndCnt leads to better selective compounds?

Tools used for this work:
Discovery Studio 3.1 and Pipeline Pilot 8.5

I-12

多次元 ADMET 最適化を指向した Matched Molecular Pair 探索に基づく知識共有
Knowledge Sharing Based on Matched Molecular Pair Analysis toward Multi-ADMET Optimization

石原 司
Tsukasa Ishihara

アステラス製薬株式会社 研究本部 化学研究所
Chemistry Research Labs., Drug Discovery Research, Astellas Pharma Inc.

製薬会社各社や公共の構造活性相関データベースの充実に伴い、莫大な化合物データから有益な知識を発掘し知恵へと昇華して創薬研究に活用することは、現代の化学情報学に課せられた重要な命題となっている。本題を解決しうる方法論として、分子構造の一部のみを異とした化合物対 Matched Molecular Pair (MMP) を探索し統計解析する Matched Molecular Pair Analysis (MMPA) が、最近急伸している。MMPA は構造変換に伴う活性・物性値変動の網羅的解析を実現する、創薬研究における強力なデータマイニング手法である。しかし、解析により得る MMP 数は解析対象化合物数を凌駕し、却って結果の解釈が困難になる事が多い。従い、知恵への昇華の具現には MMPA を補完するシステムが必要となる。

発表者らは、2006 年より MMPA に基づくデータマイニングに着手し、現在、多次元 ADMET 最適化を指向した MMP 検索システム Fragment MAP の運用に至っている。本システムは検索と結果の可視化に重点を置き、創薬化学者の志向や嗜好に応じた柔軟かつ高速な MMP 検索を可能とし、更に、連連と蓄積されるデータに呼応して自動実行される MMPA に基づく新規な知見を創薬化学者に提供する。本発表では、Fragment MAP の概要を紹介すると共に、大規模データベースの更なる活用に向けた今後の方向性について議論したい。

Rapid development of in-house and public structure-activity relationship databases has given rise to a growing potential to leverage stored information for drug discovery. Extraction of tacit knowledge from enormous databases and following evolution to practical wisdom are important missions in the cheminformatics field. A recent and attractive approach in this area is matched molecular pairs (MMPs), which are pairs of compounds that differ in a part of their chemical structures. Analysis of MMPs (MMPA) for large chemical databases can provide exhaustive expertise on how chemical replacements have affected compounds' biological activities and/or physicochemical properties. MMPA produces huge numbers of MMPs, necessitating complement systems for practical use.

Our ambitious and pioneering efforts bring an in-house system "Fragment MAP" with focusing on flexible retrieval and informative visualization of MMPA results. Our platform instantaneously enables medicinal chemists to search for and view automatically-updated MMP collection for expanding database and to ascertain which chemical replacements have the greatest likelihoods toward parallel optimization of multiple ADME/Tox properties via simple operations. Here, we will provide an overview of our system and further approaches in the application of large databases in the drug discovery process.

I-13

タンパク質–ペプチド相互作用の分子モデリングと低分子化へ向けて
Molecular modeling of protein-peptide complexes and design of peptide mimetic compounds

広川　貴次
Takatsugu Hirokawa

産業技術総合研究所　創薬分子プロファイリング研究センター
Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery (molprof)
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

タンパク質標的分子プローブの新しい設計手法として機能性ペプチドによるマイクロ抗体の創出が期待されている。大阪府立大学藤井研究室では、Helix-Loop-Helix 構造ペプチドを Scaffold にもつペプチドライブラリから、関節炎治療薬や抗アレルギーを標的としたマイクロ抗体の設計に成功しており、さらに機能性マイクロ抗体から低分子化合物設計が進められている。このような背景において、計算科学的アプローチは、マイクロ抗体の構造活性相関を理解し、合理的な低分子化合物設計を支援する技術として期待されている。本発表では、藤井研究室との共同で実施している分子動力学計算を用いたタンパク質-機能性抗体ペプチド相互作用モデリングと動的ファルマコフォアモデリングを活用した抗体ペプチドの低分子化への試みについて紹介する。

Fujii *et al.* of Osaka Prefecture University developed the conformationally constrained peptide libraries, called “MicroAntibody” based on the structural scaffold of helix-loop-helix conformation. The obtained MicroAntibodies showed high binding affinity to the various target proteins. In this study, it is desired to investigate the structure-activity relationships of MicroAntibodies and the design process of peptide mimetic compounds using computational approaches. I will introduce the molecular modeling of protein-MicroAntibody complexes using the molecular dynamics simulations and design of peptide mimetic compounds based on dynamic pharmacophore scheme in collaboration research with Fujii’s research group.

I-14

分子動力学を用いた抗体医薬の開発
Molecular dynamics simulations for antibody drug development

藤谷　秀章
Hideaki Fujitani

東京大学　先端科学技術研究センター
Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo

進行ガンの治療に有効な抗体医薬の開発を進めている。人間のガン細胞の表面に特異的に発現しているタンパク質を抗原にして、マウスで作成したモノクロナール抗体を医薬品として治療に使用出来る様に改良を加えている。患者に投与した時に素早くガン細胞に到達する様に、分子サイズを小さくする。またマウス由来の抗体の免疫原性を減らすためにアミノ酸配列をヒト型化する。このような抗原抗体に対して、35TFLOPS のピーク性能をもつ PC クラスター・スーパーコンピュータを使用して全原子分子動力学シミュレーションを FUJI 力場で行って来た。抗体医薬の開発において分子動力学シミュレーションからどの様な知見が得られるかを紹介する。

We are developing antibody drugs to treat progressive cancers. Monoclonal mouse antibodies to target proteins (antigens) at the human cancer cell surface should be modified to become medicine for patients. We reduce the molecular size of antibody in order to improve the circulation within a human body. Also, the mouse antibody should be humanized to decrease immunogenicity. All atom molecular dynamics simulations with FUJI force field were intensively performed for the antigen-antibody systems on the PC-cluster supercomputer whose peak performance is 35 TFLOPS. We show how the molecular dynamics simulations reveal the underlying physics in the development of antibody drugs.

I-15

ドラッグリポジショニングの現状と展望
Drug-repositioning

水島　徹
Tohru Mizushima

慶應義塾大学薬学部
Faculty of Pharmacy, Keio University

最近発売される新薬の数は年々減少している（2010 年問題）。この主な原因は、予想外の副作用が発生したり、ヒトで充分な体内動態が得られなかったりするため、臨床試験が失敗することである。そこで私が注目しているのは、ヒトでの安全性と体内動態が確認されている既存薬の作用を、DNA チップなどの最新の研究手法を用いて分子レベルで調べ、そこから得られた情報を活かして新しい医薬品を開発するドラッグリポジショニング（DR）研究である。DR の利点は、既に臨床で使われている医薬品なので、ヒトでの安全性や体内動態などがよく分かっており、臨床試験で予想外の副作用や体内動態の問題が発生し開発が失敗する可能性が少ない、即ち医薬品開発の成功確率が高いことである。もう一つの利点は、既にあるデータ（動物での安全性試験や第一相臨床試験など）を利用出来るので、開発にかかる時間とコストを削減できることである。言い換えれば、早く安く確実に安全な医薬品を患者さんに届けられるのが、DR 研究の利点である。本講演では、我々がこれまでに行ってきた DR 研究や諸外国での DR 研究を紹介すると共に、DR 研究を妨げる制度上の問題点なども議論したい。

The number of drugs reaching the marketplace has decreased year by year. This is because unexpected side effects and poor pharmacokinetics of possible drugs are being revealed in the stage of clinical trials. Thus, I would like to focus attention on a new strategy for drug discovery and development, drug re-profiling research. In this strategy, the actions of drugs already in clinical use, whose safety and pharmacokinetics in humans have already been confirmed, are examined comprehensively at the molecular level and results are used for the development of new medicines. The advantage of this strategy is that there is a decreased risk for unexpected side effects and poor pharmacokinetics in humans because their safety and pharmacokinetics have already been well characterized. By employing this strategy, we could also improve the efficiency of drug development by reducing the enormous amount of time, money and energy that goes into getting a product to market. For example, pre-clinical tests (such as evaluation for safety, metabolism, absorption and excretion in animals) and phase I clinical trials in humans can be omitted.

I-16

分子プロファイリングから展開する DR
Molecular profiling for drug repositioning

夏目　徹
Tohru Natsume

産業技術総合研究所　創薬分子プロファイリング研究センター
Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery (molprof), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

本講演では、プロテオミクスにおける質量分析のさらなる高感度を目指すため、産業ロボット・半導体技術や精密金属加工技術を駆使した技術研究開発の概要を紹介するとともに、そこから展開している DR 研究の概要についても紹介する。

This presentation will focus on a study of quantitative pharmacoproteomics, specifically for drug repositioning, using proteome-wide protein expression system and a novel humanoid robotics system. The system performs all preparation steps in a single integrated workflow, from preparation of cell lysates to co-precipitation prior to mass spectrometric analysis. Results will also be presented to show the increase in quality of pharmacoproteomics data generated.

I-17

医薬品開発の今後－アンメットニーズ医薬品開発とDRへの期待－
Future of drug development - Developing medicines for unmet needs and expectations for DR

塩村　仁
Jin Shiomura

ノーベルファーマ株式会社
Nobelpharma Co.,Ltd.

新規適応あるいはDDSによる投与法の改良などにより、既に医薬品として使用されている有効成分に新たな使用法を付け加え、医療においてその有効成分を位置づけ直すことは限られた資源を有効活用する点で理にかなったものである。Drug repositioningは成功確度が益々減少している医薬品開発、特に大きな市場の期待できない難病・希少疾病などのアンメットメディカルニーズ医薬品開発において、重要な位置を占めていくものと考えられる。近年、厚生労働省の尽力により、未承認薬使用問題検討会、小児薬物療法検討会議、現在は医療上必要性の高い未承認薬・適応外薬検討会議等においてアンメットメディカルニーズ医薬品への対策が講じられ、新たに多くの医薬品が開発されてきた。これらの中でDrug repositioningを利用した品目は当社品も含め相当数に上っている。本講演では、Drug repositioningにより開発された幾つかの製品や当社製品を例に挙げ、Drug repositioningに基づく医薬品開発の可能性や難しさについて考察し、今後の医薬品開発のあり方について言及する。

Future of drug development - Developing medicines for unmet needs and expectations for DR

It is indeed reasonable in terms of effective use of limited resources to add a new use for an active ingredient that has already been used as a pharmaceutical, by new adaptation or by improvement of the administration method using DDS, and repositioning it in the medical treatment management. Drug repositioning would play an important role in new drug development where rates of success are increasingly reduced, especially for unmet medical needs such as incurable and rare diseases where we cannot expect a large market. In recent years measures have been taken and many pharmaceuticals for unmet needs have been developed owing to the efforts of the Ministry of Health, Labour and Welfare, Study Group on Unapproved Drugs, Study Group on Pediatric Drug Therapy and Study Panel on Unapproved Drug /Off-label use with Medically High Necessity. Quite a few drugs, including our own products, have been developed by using drug repositioning. In this lecture, showing examples that have been developed by drug repositioning, I'd like to consider the difficulties and potential of drug development based on drug repositioning and refer to drug development in the future.

＜公開シンポジウム＞

＜Open Symposium＞

The 1st International Conference
of Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas
"Synthetic Biology for the Comprehension of Biomolecular Networks"

In order to make the paradigm shift from the concept of "watched and analyzed biology" to that of "synthetic and analyzed or utilized biology", the innovative research named *Synthetic Biology* was started from 2000 in US, such as designing synthetic genetic circuit by combining known interrelated biomaterials, realizing a certain bio-functional behaviors such as switch, oscillation, *in vivo*, designing synthetic metabolic pathways by incorporating enzyme coded genes from other origins into the cells. However, these attempts have been done on a small scale and with a trial-and-error method. On the basis of this research background, the grant-in-aid for scientific research on innovative areas (research in a proposed research area), "Synthetic Biology for the Comprehension of Biomolecular Networks" was started from 2011. The objectives of this research project is to establish the coordination between the fundamental technologies for synthetic biology in order to comprehend biomolecular networks by integrating the following three missions: 1) design synthetic genetic circuit or metabolic pathway with using the methods of computational science, 2) construct the circuit *in vitro* with using the method of engineering, 3) construct the circuit *in vivo* or in the cell with using the methods of molecular biology.

In order to construct and control a large scale of dynamic and complex synthetic genetic circuit or metabolic pathways. The fundamental technologies for synthetic biology are essential as shown in Fig. 1. In the first stage (2-3 years), our mission is to construct dynamic and multi-elements synthetic genetic circuit, followed by the construction of differentiation-induced system against stem cell and by the realization of cell factory in the last 2-years.

At this international symposium, the hot issues and expected research achievements of "Synthetic Biology" will be introduced.

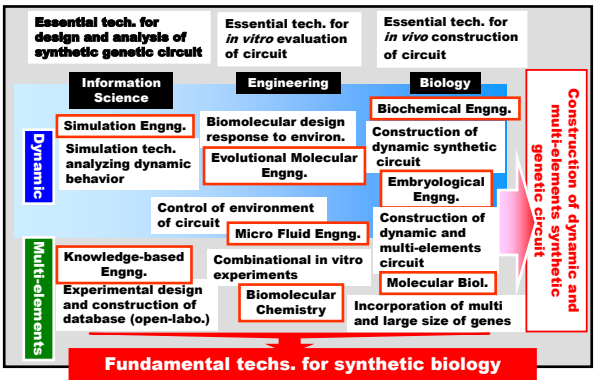


Fig. 1 Fundamental technologies for synthetic biology

Speakers:

Kenji Tsuge (Keio University)

Hitoshi Iba (Tokyo University)

Yannick Rondelez (Tokyo University)

Construction of metabolic pathways that are comprised of multi-genes by operon strategy

Kenji Tsuge
ktsuge@ttck.keio.ac.jp

Institute for Advanced Biosciences, Keio University
403-1 Nipponkoku, Daihoji, Tsuruoka, Yamagata 997-0017, Japan

Keywords: operon, synthetic biology, metabolic pathway, OGAB

In JSPS research project "Synthetic Biology for the Comprehension of Biomolecular Networks", the mission of Tsuge group is to find out design rule for artificial genetic circuits that are comprised of multi-elements. Specific research topic of my group is investigation of designing way of a gene circuit for a metabolic pathway. Living cell is comprised of many metabolic pathways, and one metabolic pathway harbors a lot of kinds of enzymes, which might be controlled precisely in terms of abundance and function at multiple levels, i.e., transcription, translation, degradation, allosteric effect, etc. To design a metabolic pathway, certain systems for balancing quantity of multiple kinds of enzymes are required. We have been proposed that polycistronic operon architecture that is well observed in bacterial genome contains hints for genome designing. To investigate possible operon mechanism, artificial polycistronic operons of several metabolic pathways that have variety in gene connection order have been tested. Construction of these complicated operons was performed by OGAB method, which is original gene assembly method using *Bacillus subtilis* plasmid transformation system [1].

For our first trial, we constructed artificial polycistronic operons that are comprised of 10 glycolytic genes of *Escherichia coli* that are dispersed individually along the genome. We focus especially on effect of gene order in polycistronic operon on function of glycolysis, since expression strength of each gene in polycistronic operon seems to decrease monotonically as apart from promoter. Many types of operon plasmids that have variety in gene connection order by OGAB assembly method were transferred to an *E. coli* strain that deleted all of glycolytic genes from genome, and then evaluated their function by growth rate in a medium containing glucose as a sole carbon source. In tested, an operon arrayed genes according to abundance of mRNA of wild type strain showed fastest growth.

To test if this engineering rule is potent in not only glycolytic operon but also other primary metabolic pathway operon, 9 genes for nonmevalonate pathway was selected for alternative target of artificial operon. Using similar strategy, we succeeded in deletion of all of nonmevalonate genes from genome of *E. coli* being complement by the operon. Thus we demonstrated generality of this rule.

Recently we concentrate our efforts on creation of artificial anthocyanin operon. Anthocyanin is one of useful metabolites of plant. Although all of genes have been revealed and cloned, it is still difficult to produce anthocyanin in bacterium. Actually, we have constructed a prototype anthocyanin operon already, but it didn't work in *E. coli*, possibly due to deficiency in operon design. To overcome this situation, we are investigating required ratio of anthocyanin enzymes by using an cell-free enzyme library, in which all of enzymes are mixed with different quantity. In collaboration with Suyama group and Rondelez group, optimal ratio for anthocyanin synthesis enzymes is getting revealed. Now we are trying to construct new anthocyanin operons according to this information.

[1] Tsuge, K., Matsui, K., and Itaya, M., One step assembly of multiple DNA fragments with a designed order and orientation in *Bacillus subtilis* plasmid. *Nucleic Acids Res.* 31:e133, 2003.

Developing frameworks for evolving biological networks with various characteristics

Dinh Quang Huy, Eisuke Takai, Yuki Naruse, Makoto Koshiishi, Noman Nasimul, Hitoshi Iba

The underlying genetic networks in living organisms are responsible for various functionalities and behavior. Two essential characteristics in gene regulatory networks are robustness and evolvability. By robustness we mean the ability of the biological function to sustain their functions under a range of different parameters resulted from random perturbation. Furthermore, it has been shown that robustness can evolve gradually in complex gene regulatory networks. Therefore, in we have designed a genetic algorithm for evolving networks that can exhibit robust behavior. We verified the algorithm with two most well studied characteristics in genetic circuits: bistability and oscillation. We studied with different levels of cooperativity in the evolved gene networks and varied the network complexity by varying the number of genes in the network. It was found that with increasing number of network components the system becomes more robust and can work with a wider range of parameters. The algorithm itself was found to be very robust in deriving the same network structure over different execution.

We have developed ERNe: a framework for Evolving Reaction Networks, directed at the evolution of biochemical systems or molecular programs. Using the framework, we could evolve credible biochemical answers to challenging molecular problems: in vitro oscillatory networks that match specific oscillation shapes. In our work, we used DNA Toolbox, a realistic simulation model which is computationally heavy. As a result, the answers we get from the evolution could precisely solve the challenging problems, and could be brought directly to the wet implementation. Moreover, some of the answers have interesting topologies that are unreported elsewhere. Thus, we believe that ERNe provides an efficient method for synthetic biologists in their in silico design of molecular programs of increasing complexity. We hope that this work will encourage further research, for example, improving and adapting efficient algorithms, into the field of synthetic biology.

Interactive evolutionary computation (IEC) is a general term for methods of evolutionary computation that use human evaluation. Usually human evaluation is necessary when the form of fitness function is not known or the result of optimization should fit a particular user preference. Since it is often difficult to convert the circuit behavior into a usable fitness function, use of IEC could be a useful framework for evolving genetic networks. Our developed IEC framework was successful to evolve different types of complex oscillatory behavior.

Spaiotemporal dynamics in synthetic reaction networks

Yannick Rondelez

[1]*LIMMS/CNRS-IIS, 4-6-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8505, Japan. * rondelez@iis.u-tokyo.ac.jp*

Molecular programming techniques based on synthetic DNA are currently opening unprecedented opportunities for the exploration of molecular informational systems. Because DNA allows easy encoding of molecular interactions and possesses a rich biochemistry, it is possible to reproduce, in test tubes, some of the most fundamental dynamic motifs of biological regulation circuits, like oscillators, bistable switches, etc. This synthetic approach provide a unique opportunity to i) better understand the structure/function relationships at the level of biological circuits; ii) use such molecular devices (computers, controlers, memories, filters, …) into integrated chemical systems; and iii) design artificial molecular systems integrating more and more life-like features.

We recently went one step further by demonstrating that molecular programmers need not restrict their inspiration to cellular circuits. Other networks, such as those formed by interdependent species (ecosystems) can also be reproduced using molecular tools. Our demonstration is based on the Predator-prey example, the basic motif of many ecosystems. This motif is well known because, somewhat disconcertingly, the simple interaction between a prey and its predator prey typically leads to sustained oscillations of both populations. We have thus encoded the topology of PP interactions in a DNA-based molecular program and confirmed the accuracy of our model by observing sustained chemical cycles in a test tube. This demonstrates the first transposition of an agent-based non trivial networks (and its dynamic behavior) at the molecular scale.

We have further extended the approach by adding additional ecologically-relevant interactions into the molecular ecosystems: competition can lead to complex, possibly chaotic behaviors, while symbiosis at the prey level tend to stabilize the steady coexistence of the species{Fujii:2013cp}. We have also integrated a spatial component into the system by moving to reaction diffusion systems, This has allowed the first observation of synthetic predator-prey "waves of pursuit and evasion" {Murray:2004ug} under the microscope.

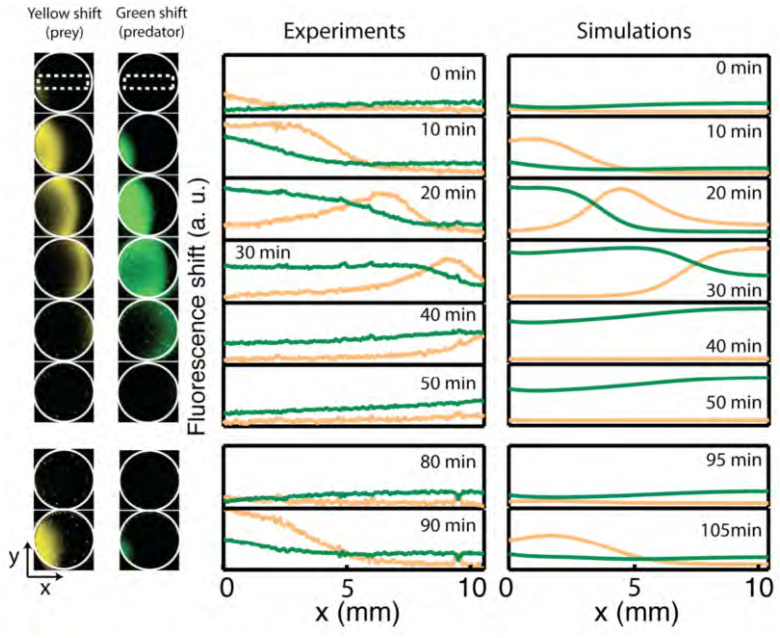


Figure 1: Waves of prey (yellow) and predators (green) in a 2D predator-prey molecular experiment. Left: Time-lapse images of the fluorescent shift in the corresponding fluorescent channels, taken every 10 min in a circular reactor 11 mm in diameter and 200 µm thick. The borders of the reactor are highlighted in white. Middle: profiles along *x* of the yellow (prey) and green (predator) fluorescent shifts. Right: 1D reaction-diffusion simulations of the normalized prey and predator concentrations.

The 2nd International Conference on "Development of Molecular Robots Equipped with Sensors and Intelligence", supported by Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas

The new scientific area “molecular robotics” aims at establishing a bottom-up approach to produce artificial molecular systems. In order to achieve this, “molecular robotics” has been selected as one of the prestigious Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science, and Technology, Japan, for the fiscal years 2012-2016. The program started in July, 2012, and is organized by 4 principal investigators, 25 co-investigators, and 27 selected researchers including biochemists, biophysicists, mechanical engineers and computer scientists, to name a few.

The 2nd Open Symposium focuses on the current status and progress of molecular robotics technologies from the viewpoints of gel-based molecular robotics, molecular control theory and practice, and DNA and liposome-based molecular robotics. Gels, liposomes and DNAs are key components used for amoeba robots and slime robots. Recently, DNA gels have attracted attention as the key devices for molecular robotics, as well as self-oscillating gel such as BZ gel.

In the gel-based molecular robotics session, Morita et al. introduce self-oscillation gel with the swelling-shrinking dynamics, which play an important role in gel robot movement. Mayama et al. discuss the theoretical foundations of oscillatory chemical reactions on Oregonator with activator and inhibitor. Kawamata et al. propose DNA cross-linked hydrogel applicable to drug release, chemical sensors and micro fluidics. Gong et al. demonstrate smart lenses made by transparent, flexible hydrogel with the property of shape memory.

The molecular control theory and practice session focuses on the foundations to control shapes and biochemical reactions in molecular robots. Umeta presents a numerical study to change liposome shapes from a circular shape to a lemon shape, flattened shape, spoon shape and a shape having long membrane projections by means of elongating cytoskeletal filaments. Ooshita et al. demonstrate a shortest path construction on grid networks with distribution algorithms suitable for molecular robot controlling. Nakakuki et al. discuss the characteristics of controller structure in biochemical reaction networks. Shimada et al. discuss a mechanism to improve the performance of DNA logic gates.

In the DNA and liposome-based molecular robotics session, Ikeda focuses on self-assembling mechanism and demonstrates a drastic morphological transformation from 2D nanosheets to a 3D network of 1D nanofibers. Natsume et al. propose giant vesicles containing microspheres as a valuable experimental model system to study transformation. Nakada et al. propose a reverse-transcription and transcription-based autonomous computing system (RTRACS) to deal with time-dependent input data in logic gate. Han et al. demonstrate automatic recognition of DNA nanostructures in AFM images using DNA pliers as an example.

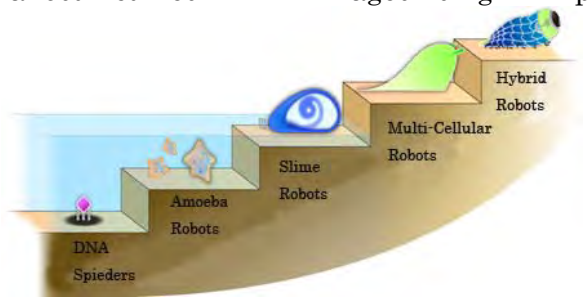


Fig. 1 Evolutional Scenario of Molecular Robots

Program

Dec. 29th (Tue) 14:00 – 15:30 Gel-based Molecular Robotics

- Hiroshi Morita, Hiroshi Morita, Yusuke Hara: Modeling and Simulation of self oscillating gel - toward a molecular gel robot
- Hitoyuki Mayama, Yusuke Hara: Spatio-temporal change of BZ gel
- Ibuki Kawamata, Satoshi Murata, Masami Hagiya: Toward Spatial and Temporal Gel-Sol Transition of Hydrogel Driven by DNA Hybridization Reaction
- Jin Gong, Takahiro Hazama, Masanori Arai, Shota Murata, Yosuke Watanabe, Masato Makino, M. Hasnat Kavir, Hidemitsu Furukawa: Smart Lenses Created with Transparent Shape Memory Gels

Dec. 29th (Tue) 16:00 – 17:30 Molecular Control Theory and Practice

- Tamiki Umeda: Numerical Studies of Protein-induced Shape Changes of Liposomes
- Fukuhito Ooshita, Shusuke Takatsu, Hirotsugu Kakugawa, Toshimitsu Masuzawa: Simple Local-information-based Self-optimizing Algorithms in Grid Networks
- Takashi Nakakuki, Jun-ichi Imura: A study on controller structure of biochemical reaction networks
- Naohiko Shimada, Wei Song, Atsushi Maruyama: Acceleration of DNA strand exchange reaction by cationic comb-type copolymers

Dec. 31st (Thu) 10:00 – 11:30 DNA and Lipid-based Molecular Robotics

- Masato Ikeda: Heat-induced Morphological Transformation of Supramolecular Nanostructures
- Yuno Natsume, Taro Toyota: Construction of Giant Vesicle Containing Microspheres at High Volume Fraction and Its Transformation
- Takashi Nukada, Koh-ichiroh Shohda, Akira Suyama: Dynamic biomolecular computing system for artificial genetic network
- Yuexing Han, Hara Akito, Akinori Kuzuya, Ryosuke Watanabe, Yuichi Ohya, Akihiko Konagaya: Towards an Automatic Recognition of DNA Nanostructures on AFM Images

＜フォーカストセッション＞

日時: 2013 年 10 月 29 日 14:00-15:30
場所: 403(4F)

フォーカストセッション

(ポスター口頭発表 第 5 分野)

生体分子認識における構造と相互作用の制御
Control of structure and interaction for biomolecular recognition

開催趣旨:
タンパク質、DNA、RNA などの生体分子における分子認識機序の解明とその応用に向けた最近の進展を、構造と相互作用の制御の観点から、気鋭の研究者３名により報告していただく。

モデレーター: **田中成典 Shigenori Tanaka**
神戸大学 Kobe University

Installation of orthgonality to the interface that assembles two modular domains in the Tetrahymena group I ribozyme (C-5-02)

井川善也 Yoshiya Ikawa
九州大学 Kyushu University

Keywords
Ribozyme, GNRA tetraloop, Tetraloop receptor, Kissing loop

Molecular evolution of a TALE protein to change DNA binding manner (C-5-27)

今西未来 Miki Imanishi
京都大学 Kyoto University

Keywords
Protein-DNA interaction, Molecular evolution, Synthetic biology

Robust in vitro affinity maturation strategy based on interface-focused high-throughput mutational scanning (C-5-03)

藤野泰寛 Yasuhiro Fujino
田辺三菱製薬 Mitsubishi Tanabe Pharma

Keywords
Protein engineering, Affinity maturation, Mutation scanning, High-throughput sequencing, Ribosome display

日時: 2013 年 10 月 29 日　16:00–17:30
場所: 402 (4F)

フォーカストセッション

情報化学の生命科学応用・若手の会プレ会

Chemical Information in Life Science, and Young Researcher Association of CICSJ
(Dev. of Chemical Information and Computer Science, The Chemical Society of Japan)

開催趣旨:

３万人を超える会員数をほこる日本化学会の５つの部会のひとつ、情報化学部会は化学研究への情報・計算機の広い活用を図ることを目的に 1982 年に設立されました。部会員の研究分野は化学情報学、計算科学、知識情報学、通信・システムなど、CBI 学会、JSBi 学会とも共通する領域が多々あります。

本フォーカストセッションでは、生命医薬情報学連合大会にご参加のみなさまに、情報化学部会の活動をご紹介し、生命科学研究における情報化学研究のコミュニティにより多くの方が集い、会員相互の情報交換、研究推進、人脈形成、知識・交流の場の提供に貢献できればと思っております。

モデレーター:　**河合 隆利　Takatoshi Kawai**
エーザイ株式会社　エーザイプロダクトクリエーションシステムズ
ＰＣサイトサービス部　業務推進部
Eisai Co., Ltd., Eisai Product Creation Systems, PC Site Service Dep.

金子 弘昌　Hiromasa Kaneko
東京大学工学系研究科化学システム工学専攻
The University of Tokyo

プログラム:

1. 日本化学会情報化学部会のご紹介
   生命科学、化学工業学等の分野で、最新の情報技術・コンピュータ技術を求められている研究者、技術者、学生の方々に、たいへん有益な部会です。活動内容を紹介します。
2. 学会誌 CICSJ, JCAC のご紹介
   情報化学部会が発行している2つの雑誌です。トピックスを特集して著名な研究者のみなさんに執筆していただいた記事を集めた CICSJ Bulletin と、ピアレビュー付き投稿論文（日本語・英語問わず）誌の JCAC を紹介します。
3. 2013 年度情報化学討論会のご案内
   筑波大学にて 11/7, 8 に開催される情報化学討論会のご案内です。プログラムやポスター演題をご案内します。
4. 第 1 回情報化学若手の会へのお誘い
   日本化学会化学会館にて 11/9 に開催される情報化学部会の若手の会へのお誘いです。
5. ケモインフォマティクス秋の学校のご案内
   奈良県立公会堂能楽堂にて 11/27, 28 に開催される国際学会のご案内です。

日時: 2013 年 10 月 30 日 10:00-11:30
場所: 研修室（4F）

フォーカストセッション

創薬等 PF バイオインフォマティクス領域での創薬支援の紹介
Bioinformatics Services in "Platform for Drug Discovery, Informatics, and Structural Life Science"

開催趣旨:
平成 24 年度に開始した創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業は、創薬プロセス等に活用可能な技術基盤の整備、積極的な外部開放（共用）等を行うことで、創薬・医療技術シーズ等を着実かつ迅速に医薬品等に結び付ける革新的プロセスを実現することを目的としています。技術基盤は、（1）X 線結晶解析・バイオインフォマティクスなどを行う解析拠点（2）化合物ライブラリーのスクリーニングを行う制御拠点（3）情報の蓄積・提供を担う情報拠点からなり、広く全国のアカデミア及び企業研究者に対して創薬や分子メカニズム研究の支援を行うとともに、技術の高度化を行っています。このセッションでは、解析拠点の中で、バイオインフォマティクス領域の研究内容、支援項目について紹介します。

モデレーター: **本間 光貴 Teruki Honma**
理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター RIKEN

1.イントロダクション
清水 謙多郎 Kentaro Simizu
東京大学大学院農学生命科学研究科応用生命工学専攻 University of Tokyo

創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業のバイオインフォマティクス領域の支援体制について、その概要を紹介します。

2. インフォマティクス関係の支援項目について
広川 貴次 Takatsugu Hirokawa
産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター AIST

創薬等 PF では、タンパク質の立体構造予測、相互作用部位予測、タンパク質-タンパク質（リガンド）ドッキング、構造決定支援、複合体構造解析等のプロテインインフォマティクスの支援研究および高度化研究を行っている。発表では、支援項目の詳細や、支援研究の実施例について紹介する。

3. シミュレーション関係の支援項目について
池口 満徳 Mitsunori Ikeguchi
横浜市立大学大学院生命医科学研究科生命医科学専攻 Yokohama city university

創薬等 PF では、生体分子における機能発現のメカニズム解明のために、分子シミュレーションの支援研究、および、方法の高度化研究を行っている。フレキシブルなマルチドメインタンパク質の構造解析について、分子シミュレーションだけでなく、X 線溶液散乱実験等と組み合わせた方法を紹介する。

4. 創薬（インシリコスクリーニング）の支援項目について
本間 光貴 Teruki Honma
理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター RIKEN

創薬等 PF では、創薬シーズや分子メカニズムを解明するために有用な分子を発見するためのインシリコスクリーニング支援研究を行っている。当日はターゲットタンパク質の構造や既知の阻害剤情報に基づいて、新規な阻害剤を探索する様々な手法について実例を交えて紹介する。

日時: 2013 年 10 月 30 日 13:30-15:00
場所: 403(4F)

フォーカストセッション

オミックス解析における実務者意見交換会
Working Group Meeting on Omics-based Analysis

開催趣旨:

ゲノム・トランスクリプトーム・プロテオーム・メタボロームをはじめとするオミックス解析は、とくに今世紀に入ってから急激な発展を遂げてきた。また、近年の次世代シークエンサーの普及により、データの解析および解釈はより複雑性を増し、この分野の研究者への期待は日々高まっている。さらに、これらのオミックス技術によって得られた異なる特徴を持つデータセットの融合的な解析も、より重要性を増しつつある。このセッションではオミックス解析に精力的に携わっている研究者の忌憚のないご意見を頂戴し、問題意識の共有やブレークスルーの可能性についてのブレーンストーミングを行う場を提供したい。

モデレーター: **茂櫛 薫 Kaoru Mogushi**
東京医科歯科大学　難治疾患研究所　生命情報学　Department of Bioinformatics, Medical Research Institute, Tokyo Medical and Dental University
神田 将和 Masakazu Kohda
埼玉医科大学　ゲノム医学研究センター　トランスレーショナルリサーチ　Division of Translational Research, Research Center for Genomic Medicine, Saitama Medical University

トランスクリプトーム解析の現況:マイクロアレイ vs. RNA-seq

門田 幸二 Koji Kadota
東京大学　大学院農学生命科学研究科　アグリバイオインフォマティクス教育研究ユニット
Graduate School of Agricultural and Life Sciences, The University of Tokyo

マイクロアレイは、データ解析が容易であるものの、解析可能範囲が搭載転写物に限定されている。一方 RNA-seq は、原理的に全発現転写物配列を取得可能であるものの、データ解析が容易ではない。このようなステレオタイプなイメージについて、以下の現況および事実(細胞内で発現する転写物の種類は有限)を踏まえ、今後の方向性や解決すべき課題について議論したい。1) 3'発現解析用アレイのイメージは相当古くトランスクリプトームアレイがすでに利用可能である。2) Affymetrix GeneChip 前処理で有名なのは RMA だが、fRMA、IRON など多くの新規手法が存在する。3) RNA-seq データをマッピングする手段は、Linux(と Macintosh)なヒトに限定されていたが、現在は Windows の R でも可能(QuasR パッケージ)。

Gene Hunting: できること・できないこと

三嶋 博之 Hiroyuki Mishima
長崎大学　原爆後障害医療研究所　人類遺伝学
Department of Human Genetics, Atomic Bomb Disease Institute, Nagasaki University

ヒト希少遺伝疾患の原因遺伝子の探索～Gene Hunting～にとって，次世代シークエンサーは長年待望された夢の機械であり，その登場によりこれまで 100 を超える疾患原因遺伝子が発見されてきている。それでは，将来すべての遺伝病の原因が突き止められるのであろうか？そうは問屋が卸さない。今回は，Gene Hunting をめぐる夢と現実について述べたい。

異種オミックスデータの融合に基づく分子間相互作用ネットワークの予測

山西 芳裕 Yoshihiro Yamanishi
九州大学　生体防御医学研究所　生体多階層システム研究センター　システムコホート学分野　Division of System Cohort, Multi-scale Research Center for Medical Science, Medical Institute of Bioregulation, Kyushu University
九州大学　高等研究院　Institute for Advanced Study, Kyushu University

ポストゲノム研究では、様々な分子(遺伝子、タンパク質、化合物、薬物など)に関するゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム、フェノームなどの網羅的オミックスデータが得られるようになってきた。これらの様々なオミックスデータを融合し、生命システムを表す分子間相互作用ネットワーク(タンパク質間相互作用ネットワーク、代謝パスウェイ、薬物・標的タンパク質間相互作用ネットワークなど)を大規模に予測するための情報科学的手法とその応用例を紹介する。

日時: 2013 年 10 月 30 日(水) 15:30-17:00
場所: 402(4F)

フォーカストセッション

医薬品開発におけるトランスレーショナル・リサーチの強化とその戦略

開催趣旨:
医薬品開発の戦略と方法は 21 世紀になってから大きく変遷しつつある。近年クローズアップされている個別化医療、コンパニオン診断薬などに代表されるように、ファーマコゲノミクスのデータに基づいて薬理効果の期待できる患者を特定し、副作用リスクを回避することが一般的になりつつある。また一方、ヒト iPS 細胞をもちいた開発候補化合物の薬理・毒性評価法の開発は、前臨床と第１相臨床試験のギャップを橋渡しする上で極めて重要になると期待されている。そのような観点から、日本が世界に対して新しい技術と知識のシグナルを発していく戦略について、参加者の皆様と一緒に話し合いたい。

モデレーター: **石川 智久**
理化学研究所・ライフサイエンス技術基盤センター

Nrf2 遺伝子多型と肺癌をめぐるトランスレーショナル・リサーチ

石川 智久
理化学研究所・ライフサイエンス技術基盤センター

日本の肺癌死亡率は近年増加傾向を示しており、特に高齢者ではこの傾向が顕著である。転写因子である NRF2 は、活性酸素に反応して抗酸化遺伝子の発現を制御するなど細胞の防御に重要な役割を果たす一方、癌細胞の増殖や抗癌剤に対する耐性にも関わる。我々は、*NRF2* 遺伝子の上流域に存在する SNP(−617C>A)が、*MDM2* 遺伝子と協調的に働いて、肺癌患者の癌進行度および治療後の生存率に関係する事を明らかにした。

Pharmacogenomics に基づく薬物副作用の解明

筵田 泰誠
理化学研究所・統合生命医科学研究センター

薬の作用とゲノム（遺伝）情報を結びつけることにより、個人個人に合った薬剤を適切に使い分けようという研究であるファーマコゲノミクス（pharmacogenomics : PGx）では、全ゲノム領域の SNP を対象としたジェノタイピングに基づく関連解析（genome-wide association study：GWAS）等の網羅的ゲノム解析が有用である。一例として、日本人におけるカルバマゼピン誘発薬疹の発症リスクと関連するゲノムバイオマーカーHLA-A*31:01 及びその遺伝子検査の医学的有用性を検証する GENCAT Study を紹介する。

iPS 細胞を用いた心臓毒性評価の共同研究

三分一所 厚司
第一三共株式会社・安全性研究所

ヒト iPS 細胞を用いた心毒性評価の有用性が期待されている中、iPS 細胞は細胞自体のバラツキ、培養方法の問題等、各研究機関や企業の研究所においては評価法が検討されている。 そこで HESI のグローバルな枠組みを用いてヒトにおける催不整脈作用をより効果的に予測する方法を模索するために共同研究を提案し活動を開始した。 第一段階としてヒト iPS 細胞を用いて得られたデータを元にデータベースを構築し、その解析から問題点を抽出してさらにと陽性物質も用いた追加試験を加えながら IPS 細胞を用いた試験の非臨床試験における位置付け、その有用性を明らかにするものである。

日時: 2013 年 10 月 31 日　13:30-15:00
場所: 研修室（4F）

フォーカストセッション

化合物ライブラリー構築
Construction of Chemical Library

開催趣旨:

HTS（ハイスループットスクリーニング）が広く行われるようになって 15 年以上が経過した。スクリーニング対象となる化合物資源をライブラリーとしてどのように収集・保有・設計・管理するのかは常に大きな課題である。当初は出来るだけバラエティーの富んだ化合物を多数集めることから始まり、数十万～100 万を越える化合物ライブラリーに至った。その過程では、GPCR やキナーゼ等の特定のターゲットを念頭においたフォーカスドライブラリーの設計が行われ、更に、FBDD を念頭に置いたフラグメントライブラリーの取組み等もなされている。HTS としてどのようなアッセイ系を実施して、得られたヒット化合物をどのように育てていくのか？！その源となるライブラリーには、単に創薬に適さない化合物を排除するだけではなく、どのような創薬を志すのかに応じた、積極的な「ライブラリー構築」が求められている。本セッションでは、国内外の講師に現状の創薬課題に応えるための化合物ライブラリー構築に関わる取組みや可能性について紹介していただき、化合物ライブラリー構築について考察・議論する場としたい。

モデレーター:　**新井　好史**（Koshi Arai）
大正製薬株式会社　Taisho Pharmaceutical　CO., LTD

ケミカルライブラリーの構築

木村　陽一（Youichi Kimura）
第一三共株式会社　研究開発本部　創薬化学研究所　Daiichi Sankyo CO., LTD

ファースト・イン・クラスの低分子医薬品の研究において、ドラッグライクな HTS ヒットを発見することが非常に重要である。製薬会社では、自社の研究で合成した化合物では構造の多様性が小さいため、市販の化合物を購入してライブラリーを拡充してきた。しかし、ヒットの発見後の高次評価にも対応可能な量で多数の化合物を購入するには莫大な費用を要する。一方、費用を削減するために購入量を減らせば、高次評価に必要な検体の入手に時間がかかり、研究が遅延してしまう。また、フェノタイプ・アッセイ(PDD)が見直されてきているが、PDD では多量の試験材料の入手が困難であったり、スループットの低さの問題から膨大な数の検体をアッセイでず、できるだけ少数の化合物で効率的にヒットを発見したいという要請が高まっている。さらに、フラグメント・スクリーニング(FBDD)技術の発達により、従来よりも分子量が小さい化合物のライブラリーに対するニーズも高まっている。本講演では、このような現在のライブラリーを取り巻く環境のなか、PPI などの新規標的にもヒットを発見でき、PDD・FBDD にも対応できる規模と質（有用性）を兼ね備えたケミカルライブラリーを構築するための取り組みについて紹介する。

Design of focused libraries – enhancing success against emerging targets

Richard Hill、 竹内　一雄（Kazuo Takeuchi）
BioFocus, Chesterford Research Park, Saffron Walden, Essex, UK

BioFocus has been a pioneer in the area of focused library design, delivering libraries which have provided outstanding success in core research areas such as kinases, GPCRs and ion channels. This presentation will review what makes a successful library design strategy together with key performance indicators and case studies. More recently BioFocus' design expertise has turned towards emerging targets namely protein-protein interactions and epigenetics. One of the main drawbacks associated with drug discovery against unprecedented targets is often the lack of suitable chemical starting points or tools. The methods and strategies BioFocus is using in the design of libraries in these newer areas will also be covered.

日時: 2013 年 10 月 31 日（木）13:30-15:00
場所: 402（4F）

フォーカストセッション

第一原理計算とメタボロミクス: 予測と実証
Metabolomics and the first-principles calculation: prediction and validation

開催趣旨:
生体内の代謝物を網羅的かつ迅速に一斉分析する代謝物プロファイリング技術は、メタボロミクス分野の発展に伴い遺伝子機能の発見、組換え植物種の化学的多様性評価等に用いられるようになってきた。一方、第一原理計算に基づいて生体分子の物性および機能を予測するシミュレーション技術の進展もまた著しい。オミックスデータ、特にメタボロミクスデータの解釈は、しばしば困難を伴うものである。多くの場合、代謝物経路に基づいて解釈を進めるが、第一原理計算による予測の導入によって、従来とは異なる視点でのデータ解釈とその実証とが期待できる。本セッションは、代謝物プロファイリング技術および第一原理計算の現状を俯瞰し、代謝物の物理化学的特性予測値と代謝物プロファイルデータとの統合研究について議論する。

モデレーター: **福島 敦史 Atsushi Fukushima**
理化学研究所　環境資源科学研究センター
RIKEN Center for Sustainable Resource Science

生命の「情報」と「物質」の交差するメタボロミクス研究における予測と実証の可能性 ― イントロダクションにかえて

福島 敦史 Atsushi Fukushima
理化学研究所　環境資源科学研究センター　RIKEN Center for Sustainable Resource Science (CSRS)

近年の技術革新により、細胞内の低分子代謝物を一斉分析する代謝物プロファイリングが精力的に行われている。このことは従来の測定を効率化してデータ生成速度を単に上げただけでなく、細胞内のさまざまなレベルの制御関係に関する包括的な知識統合を我々に強いている。本発表では、従来のメタボロームインフォマティクスの概観と理論化学による物性予測およびその実証研究の可能性について述べる。

植物の生産する代謝物群の物理化学的性質に着目した新規手法の開発

草野 都 Miyako Kusano
理化学研究所　環境資源科学研究センター　RIKEN Center for Sustainable Resource Science (CSRS)

植物は多種多様な代謝物群を生産可能であるが、その理由については未だ解明されていない点が多い。本発表では、代謝物プロファイリングで得られる化合物情報の有効利用法の一つとして、我々が取り組んでいる代謝物群の物理化学的性質に着目した評価方法について紹介する。

植物の生合成代謝経路や光防御機構の解明のための量子化学計算アプローチ

立川 仁典 Masanori Tachikawa
横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科　Department of Nanosystem Science, Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University
川島 雪生 Yukio Kawashima
理化学研究所　計算科学研究機構　RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS)

本発表では、実験的に示唆されている植物の生合成代謝経路や光防御機構を、UV-B 吸収化合物群の光特性という観点から、量子化学的手法によるアプローチを試みたい。

日時: 2013 年 10 月 31 日　13:30–15:00
場所: 403 (4F)

フォーカストセッション

（ポスター口頭発表　第2分野）

インシリコ創薬
In silico drug discovery

開催趣旨:
第２分野：インシリコ創薬は、創薬に関わる様々な新しいテクノロジーや手法および、その適用による具体的な成果等の発表の場と考えている。実際の創薬においては、化合物および標的分子の双方の情報をできる限り正確に捕え、目的とする活性と薬としての安全性を有する化合物を創製する必要がある。そこで、今回は以下の演題の発表後、インシリコ創薬に関わる課題とその解決に向けた方向性についても議論の予定。

モデレーター:　**多田 幸雄 Yukio Tada**
東京大学創薬オープンイノベーションセンター
The University of Tokyo Open Innovation Center for Drug Discovery

プログラム:

1 Toward Crowdsourcing Evaluation of Synthetic Accessibility **（C-2-13）**

Yukino Baba[1],Tetsu Isomura[2], Hisashi Kashima[1], Hirofumi Nakano[3]
[1] The University of Tokyo, [2] The KAITEKI Institute, Inc.,
[3] The University of Tokyo

2 Protein-Ligand Docking Using Artificial Bee Colony Algorithm **（C-2-01）**

Shota Uehara, Kazuhiro Fujimoto, Shigenori Tanaka
Kobe University

3 CzeekD: Fragment-based *de novo* Drug Design System for Drug Discover **（C-2-08）**

Tatsuya Yoshikawa[1], Chisato Kanai[1], Yoshihiro Yamamoto[1],
Ryuta Murakami[1], Yasushi Okuno[2]
[1] Kyoto Constella Technologies Co., Ltd., [2] Kyoto University

4 Mixed Fragment-based screening of WNK1 inhibitor **（C-2-09）**

Nae Saito, Yukio Tada, Takayoshi Okabe, Hirotatsu Kojima, Tetsuo Nagano
The University of Tokyo

日時: 2013 年 10 月 31 日　15:30-17:00
場所: 研修室（4F）

フォーカストセッション

第6回 FMO 研究会
FMO 法の創薬への適応例とその展望
Application examples and perspective to the drug discovery of the fragment molecular orbital (FMO) method

開催趣旨:

フラグメント分子軌道（FMO）法は 1999 年に北浦和夫教授等によって開発され、これにより巨大分子の非経験的分子軌道法による計算が可能になった。FMO 法のフラグメントに分割する方法はフラグメント間の相互作用、すなわち分子内・分子間の部分での相互作用解析を可能にしている。従って、FMO 計算の結果として得られるペア相互作用エネルギー（pair interaction energy; PIE）解析は非常に有用である。また、分子間相互作用エネルギーを静電、分極、交換反発、電荷移動相互作用などの物理的に分かりやすい成分に分割することができる、エネルギー分割（energy decomposition analysis; EDA）解析は、相互作用の本質を探ることができる。CBI 学会は設立以来、計算化学を用いる論理的な創薬を主要なテーマの一つとしており、FMO 法を創薬に活かすことを目的に、昨年 FMO 研究会を発足しました。

本フォーカストセッションでは、実際に FMO 法を創薬に適応した例の講演と伴に FMO 法の創薬における今後の展望について討論する場としたい。

モデレーター:　**多田幸雄**　Yukio Tada
東京大学　創薬オープンイノベーションセンター
The University of Tokyo Open Innovation Center for Drug Discovery

プログラム

1　セリンプロテアーゼ阻害剤における FMO による阻害メカニズムの考察
上村みどり　Midori Kamimura
帝人ファーマ株式会社　Teijin Pharma Limited

2　プロリン誘導体のタンパク質との相互作用
小沢知永　Tomonaga Ozawa
キッセイ薬品工業株式会社　Kissei Pharmaceutical Co., Ltd.

3　ABINIT-MP/BioStation による FMO 法の創薬への適用
福澤　薫　Kaori Fukuzawa
みずほ情報総研株式会社　Mizuho Information & Research Institute

4　フラグメント分子軌道法による SAR 解析と分子設計への期待
森　健一　Kenichi Mori
アステラス製薬株式会社　Astellas Pharma Inc.

5　リガンド-タンパク結合自由エネルギーの見積もりと FMO
市原　収　Osamu Ichihara
シュレーディンガー株式会社　Schrödinger K.K.

2013 Committee Members

2013 大会実行委員会

Chairperson

Takayoshi Okabe (The University of Tokyo)

委員長

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）

Committee

<CBI2013 Committee>

Koshi Arai（Taisho Pharmaceutical Co., Ltd）
Kouji Eguchi (CTC Laboratory Systems Corporation)
Akihiko Konagaya (Tokyo Institute of Technology)
Yuji Takaoka (Accelrys Inc.)
Yukio Tada (The University of Tokyo)
Teruki Honma (RIKEN)
Tohru Mizushima (Keio University)
Takashi Mizuma (Matsuyama University)

<CBI2013 Program Committee>

Chair: Yukio Tada(The University of Tokyo)
Yasushi Okazaki (Saitama Medical University)
Takayoshi Okabe (The University of Tokyo)
Atsushi Kasuya (Daiichi Sankyo Co., Ltd.)
Koji Kadota (The University of Tokyo)
Takatoshi Kawai (Eisai Co., Ltd.)
Akihiko Konagaya (Tokyo Institute of Technology)
Minoru Sakurai (Tokyo Institute of Technology)
Christian Schoenbach (Kyushu Institute of Technology)

実行委員・プログラム委員

＜実行委員会＞

新井 好史　（大正製薬株式会社）
江口 晃史　（CTC ラボラトリーシステムズ株式会社）
小長谷明彦　（東京工業大学）
高岡 雄司　（アクセルリス株式会社）
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）
本間 光貴　（理化学研究所）
水島　徹　（慶應義塾大学）
水間　俊　（松山大学）

＜プログラム委員会＞

委員長：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）
岡崎 康司　（埼玉医科大学ゲノム医学研究センター）
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）
粕谷　敦　（第一三共株式会社）
門田 幸二　（東京大学大学院農学生命科学研究科）
河合 隆利　（エーザイ株式会社）
小長谷 明彦（東京工業大学）
櫻井　実　（東京工業大学）
Christian Schoenbach（九州工業大学）

Shigenori Tanaka (Kobe University)	田中 成典	(神戸大学)
Hiroshi Tanaka (Tokyo Medical and Dental University)	田中　博	(東京医科歯科大学)
Hiroshi Chuman (The University of Tokushima)	中馬　寛	(徳島大学)
Noriaki Hirayama (Tokai University)	平山 令明	(東海大学)
Atsushi Fukushima (RIKEN)	福島 敦史	(理化学研究所)
Takashi Mizuma (Matsuyama University)	水間　俊	(松山大学)
Kaoru Mogushi (Tokyo Medical and Dental University)	茂櫛　薫	(東京医科歯科大学)
Yuji Mochizuki (Rikkyo University)	望月 祐志	(立教大学)
Hirotoshi Mori (Ochanomizu University)	森　寛敏	(御茶ノ水女子大学)

JSBi 年会

日時： 2013 年 10 月 30 日（木）　10:00-17:00
場所： 401（4F）

バイオインフォマティクス研究者・技術者のキャリアを考えるセッション

開催趣旨：

今世紀に入りバイオインフォマティクス関連の専攻や学科がいくつも設置されたこともありバイオインフォマティクスの教育・研究体制は整備されつつあります。しかしながら、大学院などで身に付けた専門知識を実社会に活かしていくことについては未だ発展途上であると考えられます。実社会への還元なしにバイオインフォマティクスの発展はあり得ません。実際に、企業の現場でのバイオインフォマティクスの需要は潜在的には急速に高まっていますが、この分野の人材を大量に求めようという動きには至っていません。一方、バイオインフォマティクスの専門知識や技術を身に付けた大学院生や若手研究者が実社会に役立ちたいと考えた時に、どのような可能性があるのかが広く知られていないというのが現状です。

そこで、JSBi ではバイオインフォマティクスを実社会につなげるための新たな試みとして、「バイオインフォマティクス研究者・技術者のキャリアを考えるセッション」（略称：キャリア・セッション）というセッションを設け、ベンチャー、IT 系、製薬系など多様な企業において第一線で活躍されている講師の方々に、企業におけるバイオインフォマティクス関連研究者・技術者のキャリアの実例や可能性を紹介していただくことにしました。特に、どのような人材を望んでいるか、どのようなキャリアパスが考えられるか、どのような研究開発項目があるか、など大学院生や若手研究者が将来のキャリアを考える上で参考になる事柄を中心にご講演いただきます。さらに、疑問点を解決し議論を深めるために、質疑応答の時間も十分に確保してあります。

大学院生や若手研究者の方々はもとより、学生の進路に関してより多くの情報を得たいと考えている教員の方々まで、数多くの皆様のご参加をお待ちしています。

オーガナイザー：

阿久津 達也（京都大学 化学研究所）
松田 秀雄　（大阪大学大学院 情報科学研究科）

講演者：

大野 健太（株式会社プリファードインフラストラクチャー）
山口 昌雄（アメリエフ株式会社）
奥村 利幸（三井情報株式会社）
宮本 真理（株式会社 CLC バイオジャパン）
小森 隆　（(株)インテック ）
六嶋 正知（塩野義製薬株式会社）
青島 健　（エーザイ株式会社）
水野 英明（中外製薬株式会社）

〈JSBi2013 組織委員〉

阿久津　達也（京都大学）
岩崎　渉（東京大学）
片山　俊明（情報・システム研究機構）
小池　麻子（株式会社日立製作所）
中井　謙太（東京大学：年会長）
水野　英明（中外製薬株式会社）
有田　正規（東京大学）
奥村　利幸（三井情報株式会社）
木下　賢吾（東北大学）
坂井　寛子（産業技術総合研究所）
長﨑　正朗（東北大学）

〈プログラム委員〉

荒川　和晴（慶應義塾大学）
川本　祥子（情報・システム研究機構）
渋谷　哲朗（東京大学）
内山　郁夫（自然科学研究機構）
西郷　浩人（九州工業大学）
矢田　哲士（九州工業大学：プログラム委員長）

故皿井明倫先生（九州工業大学）におかれましては、プログラム委員長を2013年7月までお務めいただきましたが、去る7月17日に急逝されました。謹んでご冥福をお祈り申し上げます。
–––––––

<JSBi2013 committee>

Tatsuya Akutsu (Kyoto University)
Masanori Arita (University of Tokyo)
Wataru Iwasaki (University of Tokyo)
Toshiyuki Okumura (Mitsui Knowledge Co., Ltd.)
Toshiaki Katayama (ROIS)
Kengo Kinoshita (Tohoku University)
Asako Koike (Hitachi, Ltd.)
Hiroko Sakai (AIST)
Kenta Nakai (University of Tokyo, JSBi2013 Organizing Chair)
Masao Nagasaki (Tohoku University)
Hideaki Mizuno (Chugai Pharm. Co., Ltd.)

<Program committee>

Kazuharu Arakawa (Keio University)
Ikuo Uchiyama(NINS)
Shoko Kawamoto (ROIS)
Hiroto Saigo (Kyushu Institute of Technology)
Tetsuo Shibuya (University of Tokyo)
Tetsushi Yada (Kyushu Institute of Technology, Program Chair)

All of us really appreciate Dr. Akinori Sarai's cooperation as a Program Chair until July 2013.
We pray sincerely for the repose of his soul.

Omix 年会

日本経済の東南アジアへのシフト：高病原性鳥インフルエンザの感染拡大阻止に向けて

感染症国際共同研究の新しい形：J-GRID

理化学研究所　新興・再興感染症研究ネットワーク推進センター　永井美之

「人体と共に、蚊と共に、貨物と共に、飛行機でやってくる。」　「やってくる」だけではない。例えばかつての麻疹のように、出かけて行くものもある。いま大流行中の風疹も、ゲノム上からはアジアからの輸入なのだが、日本で増幅され欧米諸国に輸出されるかもしれない。日本経済の世界展開の成否は、資源の乏しいわが国の将来を決する。いま、夥しい数の人々がわが国から世界各地に出かける。とりわけ途上国に。そこは感染症の坩堝である。その危険度は比較的清浄なわが国とは比較にならない。日本という閉じられた社会には今のところ見られない、あるいは、輸入症例などの形で、稀にしか経験しない感染症が甚だ多い。しかも、これらが「いずれ、大挙してやってくる」かも知れない。疾患カテゴリーのなかで、このような特徴を持つものは感染症以外にはない。感染症の研究は、がん、生活習慣病などほかの疾患カテゴリーの研究とは自然と趣を異にする。

それゆえ、真に意味ある感染症の研究を国として推進するためには、国内での研究を充実させるだけでは片手落ちである。海外の発生現場、つまり、世界中が学びの場であり、研究室であるとの立場を鮮明にしなくてはならない。子供でもわかる論理である。加えて、言うは易しく実際には難しいが、新興感染症の発生などの不測の事態をいち早く検知する仕組みを強化する必要がある。基本的視点のひとつは、感染症の坩堝である国々の研究と対策の力を強めることなしにはわが国の安全はありえないことである。

このような背景から、わが国の 8 大学 2 研究所が 8 ヵ国（アジア 6 、アフリカ 2）に 13 の共同研究拠点を設置し、これらをネットワーク化、そのオペレーションセンターを理化学研究所に置く、という「感染症研究国際ネットワーク推進プログラム」(J-GRID, the Japan Initiative for Global Research Network on Infectious Diseases）が 2005 年に発足した。各海外拠点は活発に研究を展開し、相手国、わが国、世界の感染症対策に資する成果をあげ始めた。この新しい研究プラットフォームは「科学技術外交（立国）のお手本」、つまり、日本外交の有力なソフトパワー、としても高く評価されている。仏パスツール研究所国際ネットワークは 120 年の、英オックスフォード大学国際ネットワークは 40 年の歴史をもつ。J-GRID は発足して僅か 8.5 年、いまだ揺籃期にある。この先の長期に亘る事業展開が期待される。

本講演では J-GRID 発足の背景と設立の経過、ミッション、研究成果などを紹介し、合わせて、その将来展望について論じたい。

日本経済の東南アジアへのシフト：高病原性鳥インフルエンザの感染拡大阻止に向けて

インフルエンザ RNA ポリメラーゼの構造による新規抗ウイルス剤の探索

横浜市立大学大学院生命医科学研究科／神奈川科学技術アカデミー（KAST）
朴　三用

インフルエンザは、毎年冬になると決まって流行する病気で、ウイルス感染によって引き起こされる。近年では、鳥インフルエンザウイルスの人への感染による世界的大流行が懸念されており、日本でもタミフルなどの備蓄に大変な金額が注がれている。また、2009 年４月にメキシコで発生し、大流行の兆しを見せている豚由来の新型インフルエンザ（A/H1N1）には、このタミフルなどの薬剤が有効であり、また弱毒性であることから致死率はそれほど高くない。しかし、既にタミフル耐性型のインフルエンザウイルスが発見されるなど、ウイルスの変異は頻繁に起こりうるため、このような新型ウイルスに対するワクチンや新薬の開発が世界中で積極的に行われている。

インフルエンザの RNA ポリメラーゼは、ウイルスの増殖に中心的な役割を果たしており、ウイルス RNA の複製のみならず、宿主 RNA の認識やプライマーとしての利用など様々な機能を有している。RNA ポリメラーゼは PA、PB1 と PB2 の３つのサブユニットからなり、その機能発揮のためには３つのサブユニットが全て必要であることが既に報告されている。そこで本研究では、PA/PB1 と PB1/PB2 のサブユニット複合体の構造を X 線結晶構造解析により解明した（1, 2)。この構造から明らかになったサブユニット間の相互作用は主に疎水的相互作用で構成されており、この相互作用部位の疎水性から親水性への部位特異的変異は、ポリメラーゼの活性を著しく低下させました。このことから、本研究により明らかになった構造を基にして、PA/PB1 と PB1/PB2 のサブユニット間の相互作用を阻害するような化合物をデザインすることで、RNA ポリメラーゼの働きを阻害し、ウイルスの増殖を止めることが可能になる新薬が開発されると期待される。

References

1. Obayashi E, Yoshida H, Kawai F, Shibayama N, Kawaguchi A, Nagata K, Tame JR, Park SY. *Nature*. 454, 1127-1231. 2008.
2. Sugiyama K, Obayashi E, Kawaguchi A, Suzuki Y, Tame JR, Nagata K, Park SY. *EMBO J*. 28, 1803-1811. 2009.

日本経済の東南アジアへのシフト：高病原性鳥インフルエンザの感染拡大阻止に向けて

高病原性鳥インフルエンザ H5N1 の迅速検出法と新規治療法の臨床応用

理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター　石川智久
早稲田大学アジア研究機構　工藤宏一郎、間辺利江
横浜市衛生研究所　川上千春
東京大学医科学研究所　河岡義裕、坂井優子
ベトナムBach Mai病院 Ngo Quy Chau, Nguyen Gia Binh, Nguyen Dang Tuan

21 世紀は感染症の時代とも言われている。グローバル化の進展と共に感染症の地球的拡大は、人類の将来において危機的な状況をもたらす可能性をはらんでいる。事実アジア諸国を中心に世界 15 カ国で鳥インフルエンザ H5N1 ならびに H7N9 ウイルスのヒトへの感染が発生している。急速に進行する感染症に対して、早期診断・早期治療は患者の生死を分けるばかりでなく、社会の医療および経済活動への影響を最小限にくい止める上で重要である。診断と治療が遅れれば、体内の免疫系が暴発的に引き起こすサイトカイン・ストームによって高病原性 H5N1 ウイルス感染者は死に至る。高病原性鳥インフルエンザ H5N1 ウイルスに感染した場合、病早期での早期診断と早期治療の実現と、重症例に対しての集学的強化治療を一連の包括的な治療戦略が必要である。

石川らの研究グループ（理化学研究所、横浜市衛生研究所、東大医科研）は、文部科学省の J-GRID プロジェクト(2010-1012 年度)において、高病原性鳥インフルエンザ H5N1 ウイルス早期診断のための On-site での検出技術の実現を目指し、当該ウイルスのゲノムを迅速且つ高感度に検出する方法の開発を行ってきた。さらに、ベッドサイドでの診断を可能にする迅速検出装置の試作品を開発した。

一方、工藤らの研究グループ（早稲田大学）は、Polymyxin B-immobilized fiber（PMX)-血液浄化療法により、H5N1 ウイルス感染者の血中サイトカインのレベルを短時間で劇的に低下させることを検証し、ベトナムの Bach Mai 病院で H5N1 ウイルス感染者８人のうち５人の命を救った。ベトナム北部 19 省の地方中核病院と中央基幹病院（Bach Mai 病院）との H5N1 感染に対する診療ネットワークを構築し、ベトナム人医療従事者 2000 名以上へ教育を行った。

H5N1 ウイルスの迅速検出法と H5N1 感染による重症呼吸窮迫症候群(ARDS)及びサイトカイン・ストームに対する有効的新規治療法の研究を通じて、ベトナム、インドネシアをはじめアジアの高リスク国と連携し、H5N1 診療ネットワークも築くことができた。J-GRID に代表される国際ネットワークを活用・強化し、現地の医療機関において臨床実証研究を行い、我が国の感染症対策の検討につなげる事は極めて重要であろう。

パーソナル化するオミックス医療～はじめに

村松正明　（東京医科歯科大学　難治疾患研究所　分子疫学）

P4 医療は predictive（予測）, preventive（予防）, personalized（個別化）, participatory（参加）を目標とする近未来型医療としてリー・フッド博士（システムバイオロジー研究所代表）が提唱しているものである。次々に開発されるゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボロームなど革新的なオミックス解析法や飛躍的に増大するコンピュータ処理能力を駆使して、医療やヘルスケア分野へ応用・展開することが期待されている。P4 医療の研究は米国においても端緒についたばかりであるが、本邦ではまだこの考え方が膾炙されているとは言い難い。今年米国の有名女優が自らの遺伝子検査結果を元に予防的手術を受けたことが報道されたことは記憶に新しいが、これはまさにパーソナルゲノム情報を元にした P4 医療のひとつであると言えよう。このように従来は考えられないような医療が種々の疾患において取り組みが始まることが予想される。

今回は P 4 医療にへ向かう地下水脈ともいえる研究教育活動を行っている先生方にご講演をお願いした。P4 医療では患者の治療選択への参加が必須であるが、それにはゲノムリテラシーが重要となる。これについては「顔の見えるゲノム」を教材として教育に取り組んでいる荒川先生（慶應大）にお願いをした。また遺伝子リスクを患者に返却することによる予防効果をコホート研究で解析した山崎先生（阪大）にお願いした。P4 医療にはデーターベース構築が欠かせないが、東北メディカル・メガバンクでオミックス情報、医療情報などの統合化を現場で進めている荻島先生（東北大）にこの方面での現状と今後の展開についての解説をお願いした。本シンポジウムが P4 医療をより良く理解するための一助となれば幸いである。

パーソナルゲノム時代のリテラシー教育

荒川和晴　（慶應義塾大学先端生命科学研究所）

DNA 配列決定における技術革新などにより、近い将来に個別化医療などのパーソナルゲノム時代が到来することは確実であろう。一方で、既に医療を介さない消費者直結型（Direct-to-Customer:DtoC）遺伝子検査は普及しはじめているものの、その分析の妥当性は玉石混合の側面もある。また、残念ながらパーソナルゲノム時代を受け入れる法律やガイドラインなどのシステムや、一般市民のリテラシーに関しては、技術に対して大きく遅れをとっているのが現状である。そこで、私は本学環境情報学部 冨田勝教授の全ゲノム配列を解析し、昨年度から本人の同意のもとでその配列を教材として用いる学部一年生向け講義「ゲノム解析ワークショップ」を開講しており、パーソナルゲノム時代のリテラシー教育を行っている。また、昨年教材で利用している冨田教授の配列データを実名で公共データベースにて公開した。本講演ではこの講義の取り組みについて紹介したい。

多項目遺伝子検査をもちいた生活習慣病予防プログラムと その生活習慣改善効果

山崎義光　（株式会社　サインポスト）

動脈硬化症をはじめとした生活習慣病には、多数の危険因子と関連する候補遺伝子多型関連性も報告されている。この関連する危険因子の中でも酸化ストレスは、その関連遺伝子多型と種々の病態との I 関連性が示されている。演者らは、代表的な４種の関連遺伝子多型を糖尿病患者で検索し、酸化ストレスの亢進に寄与するアレル数と血中の酸化ストレスマーカーが直線的に関連し、さらに、動脈硬化の進展や心筋梗塞の発症とも関連することを明らかにした。これら酸化ストレス関連性以外の動脈硬化や生活習慣病関連遺伝子多型を絞り込み６２種の遺伝子多型を同時に同定可能な SNP チップを開発作成した。遺伝子検査結果と臨床検査結果から、糖尿病患者の動脈硬化進展予測や心筋梗塞・脳梗塞の発症リスク診断プログラムを提供している（http: //www.signpostcorp.com)。

著者らが採用した動脈硬化関連遺伝因子は、基礎的病態に関連する”functional”な遺伝子多型であり、生活習慣病の各種病態に寄与する、数種の遺伝因子の多寡に対応した、栄養＆運動指導プログラムも提供している（http://www.signpostcorp.com)。

この体質遺伝因子の型に対応した、栄養＆運動指導プログラムにより、従来はあまり有効ではなかったメタボリック症候群に対して、明らかな指導効果（体重減少のみならず、血圧、血糖値などの改善）も認められ、また経年観察の結果、生活改善指導の効果が数年継続していることも最新のエビデンスとして報告したい。

参考文献

1.山崎義光　生活習慣病の遺伝因子と体質遺伝子検査　臨床化学 40: 28-35, 2011
2.山崎義光　生活習慣病の遺伝子診断ガイド　日本医事新報社　東京　2008

東北メディカル・メガバンク事業における
ゲノム・オミックス情報と医療情報等の統合

荻島創一　（東北大学東北メディカル・メガバンク機構医療情報 ICT 部門）

東北メディカル・メガバンク機構は、未来型医療を築いて震災復興に取り組むことを目的に設置された。東日本大震災の被災地の地域医療再建と健康支援に取り組みながら、医療情報とゲノム情報を複合させたバイオバンクを構築する。本機構が取り組む東北メディカル・メガバンク事業は、主に、医療情報とゲノム情報とを組み合わせたバイオバンクの構築、地域医療情報連携基盤の構築、高度専門人材の育成の 3 つに分けられ、およそ 10 年に及ぶ事業を計画している。構築されたバイオバンクから遺伝情報の解析を進め、ゲノム情報に基づいた未来型医療を築くことを目指している。

ゲノム情報に基づいた未来型医療の実現のため、提供された血液等からゲノム解析や生体機能分子解析を行い、この解析情報と健康調査情報および診療情報等とあわせて、遺伝子や環境が疾患に関わる仕組みの解明に取り組む。そのためには、ゲノム・オミックス情報と医療情報、検査情報、調査票に基づく生活・食習慣情報を統合したデータベースを構築する必要がある。本講演では、複合バイオバンクである東北メディカル・メガバンクにおけるゲノム・オミックス情報と医療情報、検査情報、調査票に基づく生活・食習慣情報等の統合について発表する。

チュートリアル
ランチョンセミナー
スポンサードセッション
オーガナイズドセッション

FMO チュートリアル

―創薬研究に役立つ機能の紹介と
新開発の FMO 計算支援ソフト"FU"と GAMESS を用いた計算実習―

CBI 学会 FMO 研究会　主催

日時：2013 年 10 月 28 日（月）13：30-17：30
場所：タワーホール船堀　４０１
募集人数：３０名
講師：北浦和夫（神戸大学)、Dmitri G. Fedorov（産業技術総合研究所）ほか

プログラム

１　講義　（13:30～15:10）

1-1 FMO 法の説明
1-2 創薬で役立つ機能（部分構造最適化、溶媒モデル等）の説明
1-3 GAMESS-FMO の説明

休憩

２　実習　（15:20～17:00）

2-1 FMO 計算支援ソフトウェア「ＦＵ」の機能と使い方
2-2 モデル系を用いた様々なＦＭＯ計算の実習
2-3 タンパク質- リガンド複合体モデルの計算と結果のグラフ化

３　質疑応答　（17:00～17:30）

GAMESS のダウンロード（Windows 版実行形式であればコンパイルの必要がありませんので比較的簡単です）を済ませておいていただければ、初心者でも参加可能です。
USB メモリでデータの受け渡しができるパソコンをご用意ください。例題などで使うデータ全てを USB に入れて配布する場合もあります。GAMESS の使用ライセンスを取ってもらう必要がありますので、GAMESS のプレインストールは条件とします。

GAMESS のインストール：
http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html

参考資料：(CBI2013 年大会の HP からダウンロードが可能です)
README.pdf
fu-ProgramingGuide-5.pdf
fu-UsersGuide-5.pdf

日時：10月28日（月）16:00～18:00

場所：4階研修室

参加費無料（CBI 学会 2013 年大会への参加登録は不要）

チュートリアル

NGS データ解析入門

― SNP 解析 ～ 癌ゲノム解析まで ―

株式会社ジナリス

内容：

次世代シーケンシングのデータ解析初心者の方を対象に、解析目的ごとに適した解析ツールの紹介、各解析段階での QC 方法や注意点など、NGS データを手にしたときに知っておきたい様々なことについてご紹介いたします。

セッション 1. 実験条件編：解析アプリケーション入門

NGS データ解析の対象となる各種解析アプリケーション（Exome-seq など）と、データ解析に影響を与えるシーケンス実験のオプションに焦点をあてます。

セッション 2. 解析ツール編：目的別解析ツールのご紹介

一般的な変異解析から癌ゲノム解析まで、各種解析ツールやその選び方など

ゲノムからメタボロームまで、実験・解析すべておまかせ！
次世代シーケンシング、メタボローム解析、バイオインフォマティクス、
データ解析システム、ほか

【お問い合わせ先】 株式会社ジナリス　バイオ IT 事業部
〒230-0046 神奈川県横浜市鶴見区小野町 75-1 リーディングベンチャープラザ 2-308
TEL:045-710-0921　FAX:045-710-0978　E-mail:genome@genaris.co.jp

GO club ジナリス・オミックス・クラブ会員大募集！
★オミックス関連最新情報や有用情報をいち早くゲット！
★会員特別キャンペーンや、特典付きサービス有り！
★登録費用、年会費等は一切無料です。
http://genaport.genaris.com

Genaris

Gena GenomeManager

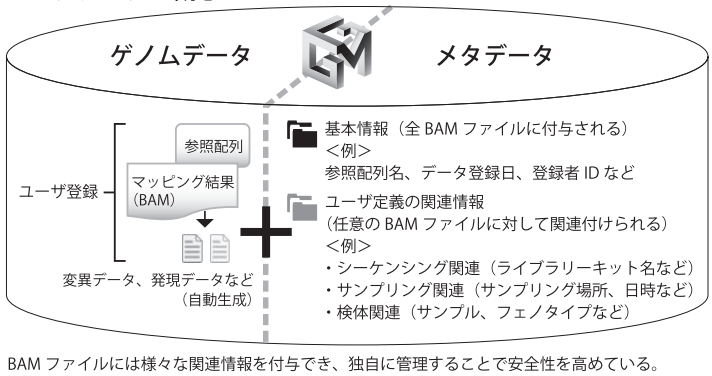
NGS データ蓄積・管理システム

1000 サンプル規模のゲノム解析データを一元管理できるハードウェア一体型システム

ベンチトップ型を含め、次世代シーケンサーの普及が進んだ今、大規模な NGS 関連データを効率的かつ安全に蓄積、管理するための情報システムの必要性が増してきています。このようなニーズを受け、ジナリスは、複数のプラットフォームと解析アプリケーションを対象とした膨大なデータ の蓄積、管理、分析を行うことを可能にするシステム GenaGenomeManager™ を新たに開発しました。1000 サンプル規模の NGS データを解析条件やサンプルの属性などの関連情報（メタデータ）と共にデータベース化することがで き、変異や発現データとメタデータを組み合わせた複合的な解析が可能となるシステムです。例えば、形質や栽培条件と変異株ゲノムデータを組み合わせれば育種株 の管理や比較研究に役立つほか、Exome データとカルテ情報を統合的に管理することで GWAS 的な解析ができる環境を構築することも容易です。

- 軽くてわかりやすいインターフェース
- システム管理者不在でも安心
- 各種シーケンサー・アプリケーションに対応
- 多種多様なメタデータをゲノム情報と合わせて管理

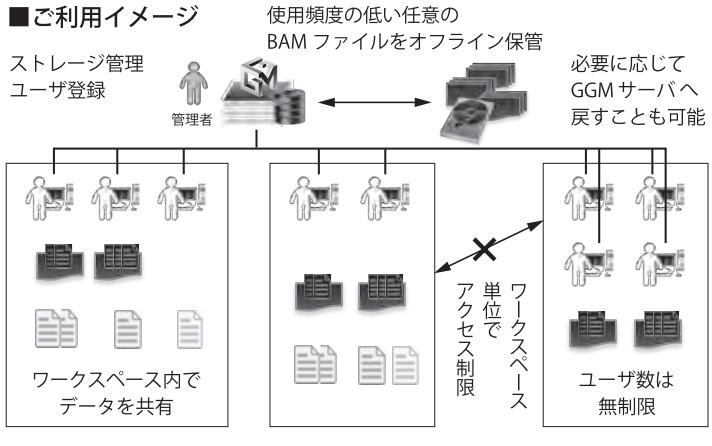
■メタデータの概念



BAM ファイルには様々な関連情報を付与でき、独自に管理することで安全性を高めている。

- 多サンプルのデータを容易に比較
- 拡張可能なストレージ
- オフライン機能によるディスク容量の大幅節約
- ワークスペース単位でデータを共有

■ご利用イメージ



マッピング結果（BAM）　変異データ、発現データなど

ぜひデモで体感してみてください！ お問い合せは genome@genaris.co.jp まで

http://genaport.genaris.com

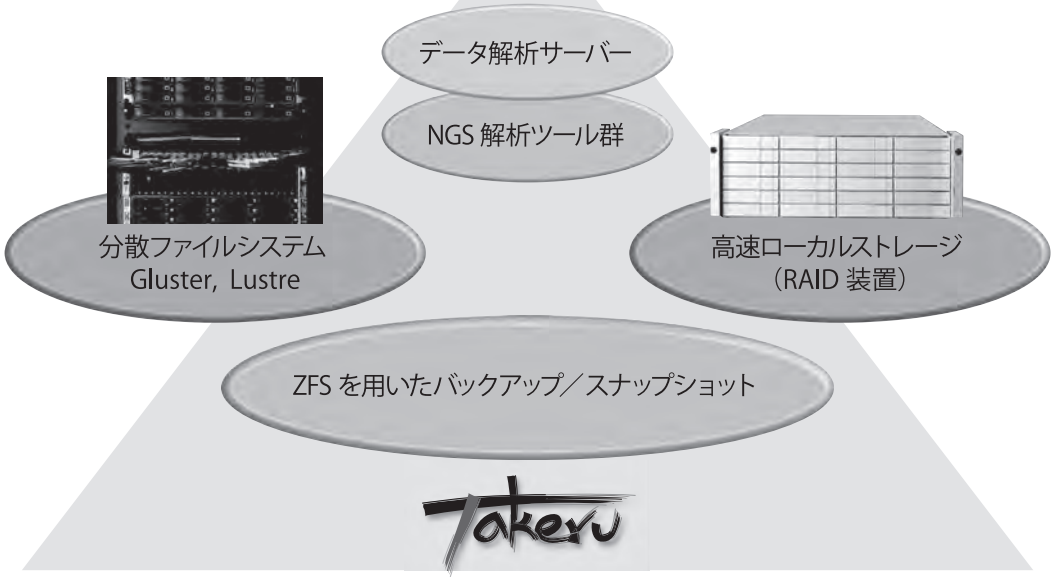
ゲノム超ビッグデータ時代、到来。

Takeru
Beowulf Cluster Reference System

手元でもデータセンターを構築する。
次世代シーケンサー向けデータ解析システム
Takeru for Sequencerシリーズ

Takeru RAID Server

Takeru for Sequencerシリーズが支える ゲノムビッグデータ処理



NABE³ International
株式会社 ナベ インターナショナル

〒300-2635　茨城県つくば市東光台5-9-1
つくばイノベーションベース（TIB）204号室
Tel: 029-886-4181

http://www.nabe-intl.co.jp/

生命医薬情報学連合大会　ランチョンセミナー
日時：2013年10月29日（火）12:00-13:00
場所：タワーホール船堀　　福寿（2階）

次世代シーケンシングデータ解析の可能性を拡げる信頼性に優れた道具としての解析システム

株式会社ナベ インターナショナル　セールスマーケティング部　渡辺理恵

次世代シーケンシング技術の急速な発展に伴い、得られる膨大なデータの解析手法は急激に増加そして進化し、また応用分野も多岐にわたっています。次々に生み出されるデータとその解析手法を研究において試すにあたり、どのようなデータ解析システムを使用するかは悩みどころです。

本セミナーでは、弊社製品Takeruシリーズユーザー様の声を基に、次世代シーケンサーデータの解析に伴って発生する希望と問題点を挙げ、その達成および解決方法について紹介いたします。また、次世代シーケンシングデータ解析の可能性を拡げる信頼性に優れた道具としての解析システムTakeruシリーズにつきまして、製品動作デモンストレーションを含めてお話させていただきます。

Ingenuity 社 Pathway 解析、Variant 解析ソリューションのご紹介

トミーデジタルバイオロジー株式会社
アプリケーションスペシャリスト
田中英夫

マイクロアレイや NGS などの大量のデータを出力するテクノロジーの発展に伴い、これらのデータの解析や解析後の生物学的解釈の重要性が高まっています。
Ingenuity Systems は様々な論文からヒューマンキューレトを行うことで収集した情報と公共データベースより収集した情報より独自構築されたナレッジベースを作成しており、ナレッジベースを活用したソフトウェアとして Ingenuity Pathways Analysis や Ingenuity Variant Analysis を提供しています。

本講演では Ingenuity Pathways Analysis と Ingenuity Variant Analysis をその活用例と共にご紹介いたします。

Ingenuity Pathways Analysis について

RNA-seq や遺伝子発現アレイによって得られた発現変動遺伝子群がどのような疾患、生物学的機能、パスウェイに関与するかを解析することが出来ます。またナレッジベース内の分子（遺伝子、タンパク、医薬品、代謝産物等）を検索し、それらに関する知見を確認をしたり上流、下流の相互作用を持つ分子の探索などを行うことが出来ます。

Ingenuity Variant Analysis について

NGS の登場によって大量のシーケンスデータを得ることが可能となりました。Ingenuity Variant Analysis はこのうちヒトの DNA-seq で得られた挿入、挿入、欠失等様々な Variant 解析を行うために開発されたソフトウェアで Variant データから疾患に関連する Variant を簡単な操作で絞込みをすることが出来ます。

INGENUITY SYSTEMS

Digital Biology

Ingenuity® Variant Analysis™

膨大なVariantデータにお困りの方へ

Ingenuity® Variant Analysis™ はヒトのリシーケンシングデータより得られる膨大なVariantデータの中から疾患などと関わる有用なVariantを絞り込む解析ツールです。

絞込み例	Variant数
実験により得られたVariant数	1,000,000
頻度の低いVariantのみに絞込	100,000
表現型に影響するVariantのみに絞込	1,000
Case Control Studyによる絞込	100
疾患、機能等に関連するVariantのみに絞込	10

絞り込みに使用出来る情報の例
・疾患
・シグナリングパスウェイ
・細胞表現型/臨床表現型
・疾患関連遺伝子
・細胞内プロセス

輸入／販売元
トミーデジタルバイオロジー株式会社
「エッジ」ビル　〒110-0008 東京都台東区池之端2-9-1
TEL 03-5834-0810　FAX 03-5834-1888
本社　〒179-0073 東京都練馬区田柄3-14-17
E-mail　info@digital-biology.co.jp
URL　http://www.digital-biology.co.jp

開発元
米国 / インジェヌイティーシステムズ社
URL　http://www.ingenuity.com

パトコア株式会社CBIランチョンセミナー講演要旨
講演タイトル：合成展開支援ツールCRAIS Transformer のご紹介 / 松本佳子

「CRAIS Transformer」（クレイス トランスフォーマー）は、変換元の構造を描画し、生成ボタンを押すだけで「これは面白い！」という変換アイデアが提示されるシステムです。

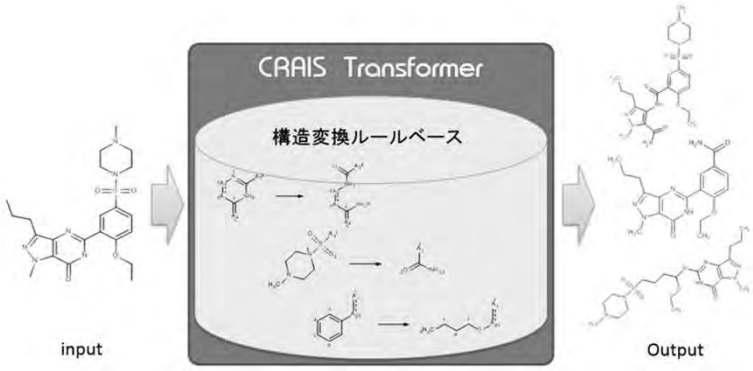
構造変換は、実験や経験に基づいた知識ベースにより行われます。本製品には等価変換例の代表的なデータベースであるEMIL（京大・藤田稔夫先生監修）およびBioster（Dr. Istvan監修）をルールとして提供しています。
さらに、社内外で蓄積した経験・知識を独自ルールとして取り込み、利用できます。
思いもよらなかったアイデアの獲得、合成研究者のノウハウ継承などに役立てることができ、より良い化合物をより早く創出することが期待できます。

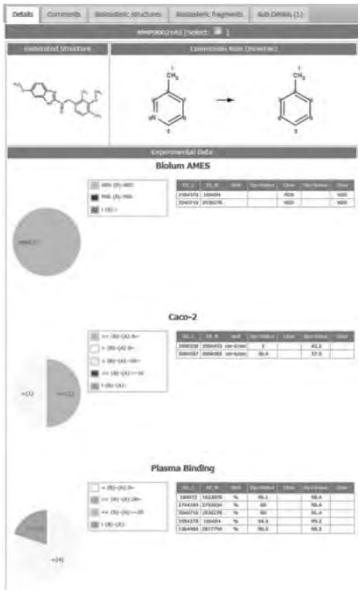
具体的活用として、例えば近年活発に行われているMMP解析の結果をルールとして取り込み、利用することが挙げられます。これまで活用が難しかった社内の実験データ由来の変換知識が、合成展開の現場で容易に利用できるようになります。変換前と後の実験データの変化が視覚的に把握できるので、当該変換の妥当性を迅速に確認することが可能になっています。

また、変換候補として示される構造を絞り込みたい時は、様々な制限機能を組み合わせて使うことができます。

- 指定した部分構造のみを変換対象とする
- 計算物性値（MW、logP、リング数、キラルアトム数など）
- 特定の構造を持つものを排除する（既知の変換例、毒性関連部分構造など）
- 同一の骨格を持つ構造を排除する（骨格変換に利用）

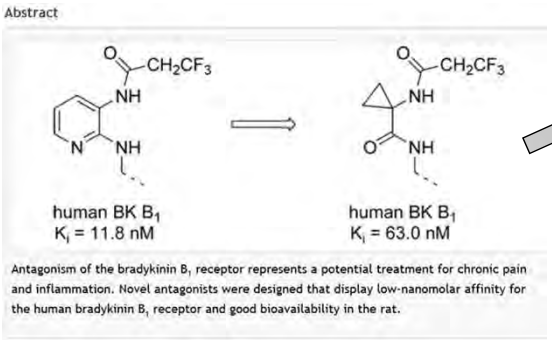
構造変換ルールに基づき合成展開アイデアを自動生成
MMP解析結果など社内データの積極的活用も促します！





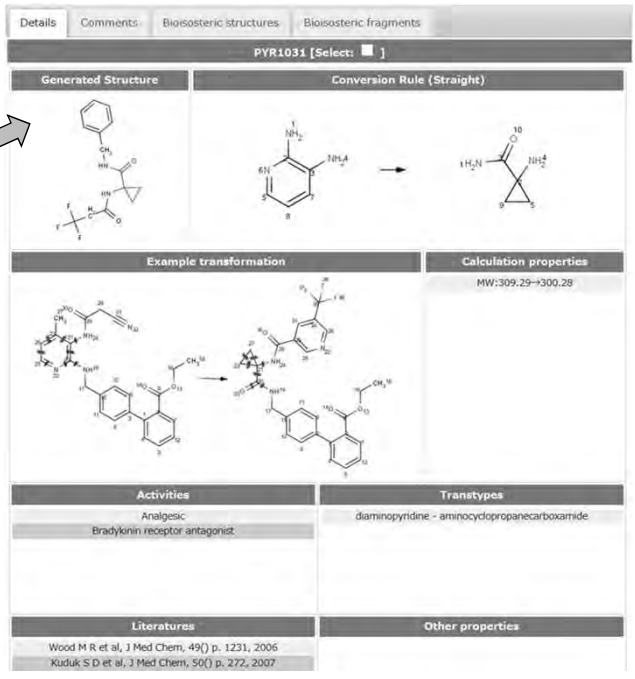
MMP解析結果由来の変換ルール表示例

変換構造提示例



Med. Chem., 2006, 49, 1231.

Transformerで生成された斬新な構造変換例。
右図が変換に使用されたルール。
詳細画面では、ルールの元となった代表変換例や参考文献、活性情報などを見ることができます。

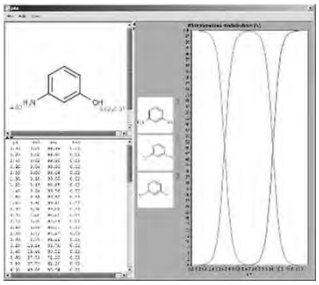


構造変換アイディア活性化ツール　CRAIS Transformer

構造最適化に「ひらめき」を与える「面白い構造変換例」を提供し着想を活性化
より良い化合物をより早く創出する為のプラットフォームを提供

- 知識ベースに基づき、入力構造から構造改変案を提示
- 自社ルールを容易に一括取込し、利用可能（自社実験データ、公的DBのMMP解析結果など）
- マニュアルキュレーションされたEMIL、Biosterの知識ベースを提供
- 社内外の広範な変換知識の活用を容易にし、化合物デザインカをアップ
- 目的に応じた生成構造の制限が可能

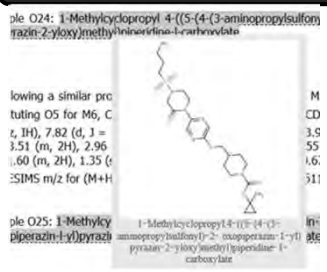
高精度pKa推算プログラム　Calculator Plugin Protonation-bundle



業界最高水準の精度を有する、トレーニング可能なpKa推算ツール

- パーシャルチャージディストリビューションに基づき、pKaを推算
- 計算結果をグラフィカルに表示
- 実測値でトレーニングが行え、 特定プロジェクト内でさらに高精度の予測が可能
- JChem for EXCEL、Instant JChemの関数として利用可能
- PipelinePilot、コマンドライン、独自プログラム（API）から利用可能
- 広範囲の値を計算可能

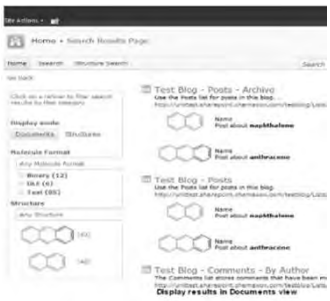
文書から構造式を抽出　Document to Structure



他社特許分析を迅速化。簡単で変換率の高い構造抽出ツール

- PDFなど文書ファイルを読込むだけの簡単操作
- 変換部分をハイライト表示し、構造式をポップアップ表示
- OCRエラーを自動修正し、既存製品より高い認識率を達成
- キャラクター化されていない（画像）PDFも認識可能
- オプションで中国語体系名からの変換も可能
- PipelinePilotと連携や、APIを用いて自動化処理が可能

SharePointで構造情報を活用　JChem for SharePoint



研究報告書、SDSなど様々なドキュメントを構造検索可能にします。

- SharePointに保管したあらゆるファイルに対し構造検索を可能とします
- 埋め込み構造オブジェクトのみならず、一般名、CAS番号、化学名、smiles、画像の構造式など、あらゆる構造情報を内部的に構造式に変換し、構造検索を実現
- SharePointで構造を扱うウェブパーツを提供し、ポータルやWiki、リストでライブ構造式が容易に扱えます
- logPなどの物性計算が可能です。

創薬基幹システム　CRAIS シリーズ

Webベースの創薬基幹システム統合ソリューション
クラウドにも対応しより迅速な導入と容易な運用管理を実現

- 化合物登録システム　CRAIS Registration
- 統合検索参照システム　CRAIS Browser
- アッセイデータ登録システム　CRAIS Assay
- 法規制チェックシステム　CRAIS Checker
- 試薬管理システム　CRAIS Reagent

Patcore

お問合せ:
パトコア株式会社 www.patcore.com
info@patcore.com　Tel. 03-5422-7101
担当：有賀、松本

日時：10 月 30 日 11：30-12：30

会場：タワーホール船堀 桃源（２階）

疾患関連遺伝子からの化合物探索と Polypharmacology

株式会社ワールドフュージョン
川原　弘三
緑川　　淳

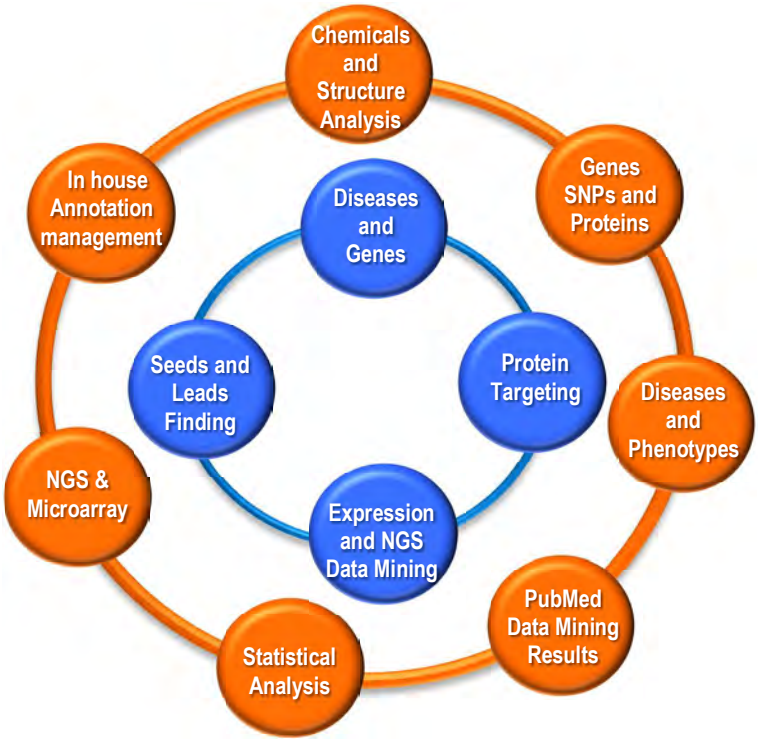
実験や既存 Pathway などの機能データベースを利用した遺伝子機能解析によって得られた遺伝子セットから、どの遺伝子/タンパク質を Target にするか 現実的な問題となる。
LSKB では、NGS や MicroArray の解析結果を Private Data として 登録する機能があり、Biosystems など 公共の Pathway 情報も遺伝子とともに 化合物情報、文献情報、さらに関連疾患ともども登録される。
Private Data として登録されたインハウスデータは関連情報として、パブリックデータともども検索が可能であり、候補遺伝子セットのみならず、その遺伝子が含まれる Pathway に含まれる 遺伝子郡をまとめて 情報探索が行える。
このようなデータベース間を串刺しで検索する基本機能を LSKB は得意とする。さらにこれらのデータベースに対し、独自のクエリーと処理を行おうとすると、Pipeline Pilot が便利である。
LSKB と Pipeline　Pilot を利用することで、さらに LSKB に登録された DB 以外のデータ、たとえば自社 DB などを同じスキームで検索、処理することを実現する。
遺伝子セットに、どの遺伝子に結合、あるいは阻害する化合物がどれくらいあり、入手可能性や、Drug なのかで絞りこみをして、構造、活性値を取得できる。
また、構造に紐づく Molecular Framework を登録しているため、Molecular Framework と Target の polypharmacology や同じ Scaffold 内で 構造の違いによる Activy Cliff の情報など が取得できる。
さらに、Target Class 情報から Molecular Framework による Cluster と そこに含まれる化合物の活性値の範囲、SAR の Matrix により シリーズの解析や理解が可能となる。
創薬場面での利用を実際の動作とともに紹介する。

Knowledge Station for the CHEMICALGENOMICS

Life Science Knowledge Bank

Implementation of
Public Resources and In House Data

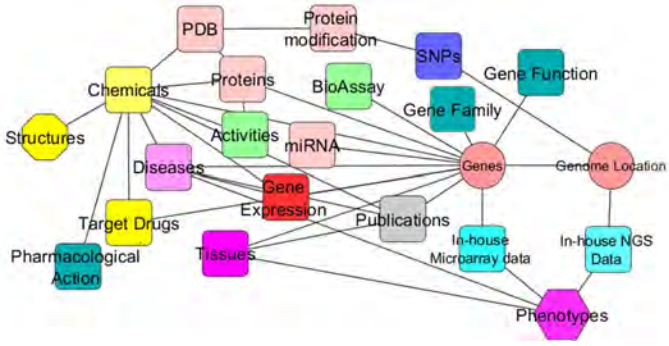
The **LSKB** (Life Science Knowledge Bank) has been widely supporting seed- and lead-finding processes for medicinal chemists and biological discoveries using Microarray and/or Next generation sequencers.
The core technologies are annotation management, data analysis, retrieves from public data sources, and management of in-house knowledge.
For chemists, LSKB provides non-redundant 70million chemical structures based on its chemical dictionary, which links to the chemical information, i.e., pharmacological actions, target proteins, protein binding ligands, bioassays, activities, etc. with a unique searching system.
For biologists, it provides genes, diseases, tissues, microarray supported tools, genomes, and annotations which can be utilized to built- in statistical analysis methods for NGS and microarray data or data mining for finding target proteins. Also the variety of the data management tools for experiments, phenotypes, annotations are the strong function for the genome based studies.



All public and private knowledge are implementable in LSKB

LSKB data sets are linked between Bio/Chem-knowledge, it accelerates borderless data mining for informatics researchers

LSKB Database gives you a productivity for Informatics; LSKB Database provides annotation information about genes, proteins, compounds, and their structures, extracted literature information and assay activities which were gathered, cleaned, and organized from over 20 public databases relevant to their genomes, compounds, diseases, and organs. In addition, the LSKB system will be updated every 4 months.



Each data content connected by several IDs, and it is easy to access from in-house analysis data generated by Microarray or NGS data sets.

LSKB Tools accelerate discover Targets for Bio and Chem

LSKB contains various searching systems and analysis functions to perform a variety of useful tasks, including a prediction of functions of proteins and compounds, prior literature extracts, and a forecast of the functionality from a chemical structure.

LSKB and Pipeline Pilot integration helps flexible data mining

WF provides a LSKB component for Accelrys Pipeline Pilot. Pipeline Pilot makes you integrate LSKB data and your in-house data by LSKB components, and this allows own data mining work flow using these data sets.

URL: http://www.w-fusion.com **E-Mail: wfinfo@w-fusion.com**

小型低温自動倉庫（つばき ラボストッカ® ミニ）のご紹介

松本 展明 Nobuaki Matsumoto

株式会社椿本チエイン マテハン事業部 開発部 開発 2 課
Development Section No.2 Development Department Material Handling Division Tsubakimoto Chain Co.

椿本チエインでは、低分子化合物保管用の比較的大規模のラボストッカーを核とした研究用保管機器を製薬企業様へ多数導入させて頂いています。 また、大学を中心とした試料管理の要求の急速な高まりや、化学・フィルム・化粧品・食品等の異業種から製薬参入の加速、大手製薬会社の巨大な化合物ライブラリの他にローカル研究室への分散化動向を背景に、設備投資面からまずは小型機を導入し、将来拡張が容易な自動倉庫の開発を行いました。本セミナーでは小型自動倉庫に求められる技術課題と対策、装置導入への留意点について紹介致します。開発・導入事例を交えご紹介いたします。

超低温要素技術のご紹介

西井 久雄 Hisao Nishii

株式会社椿本チエイン マテハン事業部 開発部
Development Department Material Handling Division Tsubakimoto Chain Co.

高分子、または生体試料等の保管ニーズが高まり、-80℃、-150℃のシステム開発・製品化に注力しています。超低温環境に求められる技術課題の第一はサンプル品質（暴露）と機械品質（寿命）の両面でのアプローチです。また冷凍システム不具合時の安全性対策も重要です。システム導入時の留意点や現在進行形の開発内容、細胞培養関係の周辺技術の開発事例を交え当社の取り組みをご紹介いたします。

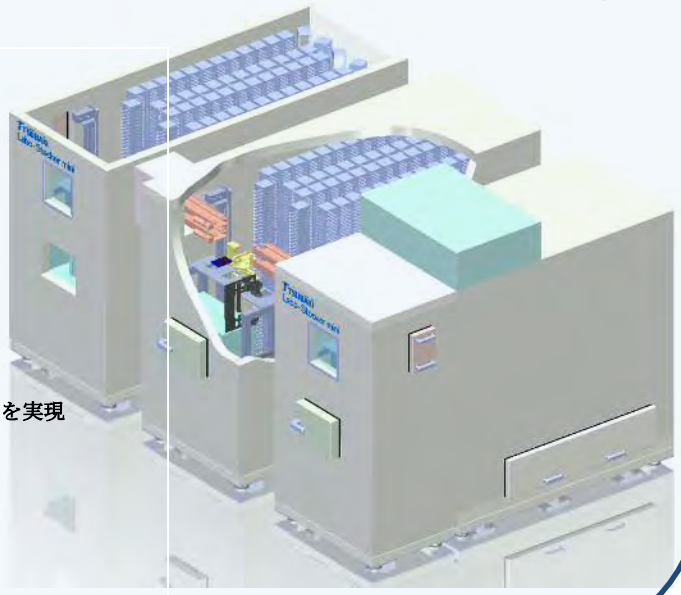
つばき
創薬研究支援機器

つばきラボストッカ® ミニ

つばきラボストッカミニは、設置スペースに限りあるお客様の要望にお応えする自動ピッキング保管庫です。
小型サイズの自動保管庫に、可能な限り保管容量を確保します。将来の増設も容易です。
従来のラボストッカと同じく、マイクロチューブ、３８４チューブ、プレート（SBS 規格準拠品）、バイアル瓶を個別に冷凍環境で保管します。ピッキングは移載ユニット、ピッキングユニットにより高速かつ正確です。

■特徴

・小型で高収納
・ユニット増設で保管量を容易に拡張可能
・設置、搬入も手軽
　ユニット単位で分割搬入→エレベータで搬入可能
・各研究者の端末からデータ検索や入出庫指示が可能
・サンプル、残量、使用回数等のデータ管理
・標準ユニットの組合せで、ニーズに合わせた入出庫能力、レイアウトを実現
・バーコード、２Ｄコード読取による確実な管理
・導入時、既設ラボストッカとのデータ共通可能
　※注１　1,050W×2,000H×2,000D以上のエレベータサイズ

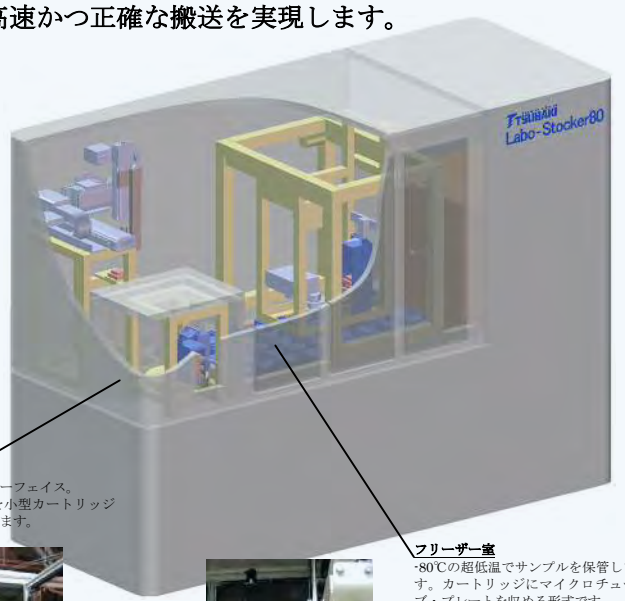


つばきラボストッカ® 80

つばきラボストッカ８０は、ご要望の多い－８０℃での保管を可能にした自動ピッキング保管庫です。
マイクロチューブ、３８４チューブ、プレート（SBS 規格準拠品）を個別に冷凍環境で保管します。
当社独自の移載ユニット、ピッキングユニットにより高速かつ正確な搬送を実現します。

■特徴

・小型・高収納
・専用カートリッジにより３ＲＡＣＫ取扱い
・バックアップ機能（炭酸ガス・タンデム方式）
・異常時、サンプルを－８０℃へ強制搬送
・暴露防止のため、２Ｄ読取高速化
・ＲＡＣＫ／ＴＵＢＥ切り離し機能設置
・バーコード、２Ｄコード読取による確実な管理



入出庫口
研究者とのインターフェイス。
常温でサンプルを小型カートリッジ単位で出し入れします。

フリーザー室
-80℃の超低温でサンプルを保管します。カートリッジにマイクロチューブ・プレートを収める形式です。
温度帯バックアップとして、炭酸ガス・タンデム方式も用意しています。

Innovation in Motion
TSUBAKI
株式会社 椿本チエイン マテハン事業部 創薬プロジェクト課
〒108-0075
東京都港区港南 2-16-2　太陽生命品川ビル 17F
TEL：03-6703-8402　　FAX：03-6703-8412
URL：http://www.tsubakimoto.jp/product/matehan/soyaku/

HUMAN HEALTH

ENVIRONMENTAL HEALTH

パーキンエルマー
ランチョンセミナー

CBI学会2013年大会
日時：10月31日（木）12:00-13:00
場所：桃源（２階）
演題：既存薬・計算化学・創薬・受託サービスの世界を紹介

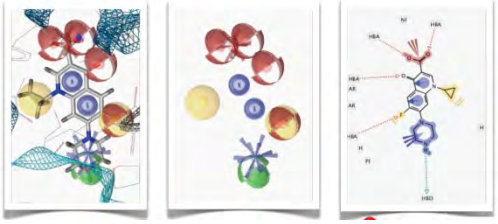
PRESTWICK CHEMICAL
The medicinal chemistry company

合成した化合物を PDS で評価

データを素早く フィードバック

PerkinElmer
For the Better
PerkinElmer Discovery Services (PDS)

Features: Electrostatic interactions, H-bonding, aromatic interactions, hydrophobic regions, coordination to metal ions ...



パーキンエルマージャパンでは、仏・プレストウィックケミカル社の日本総代理店として、既存薬ライブラリー・天然物ライブラリーなどの販売、リード化合物からリード最適化までを提供する設計・合成受託を提供します。また、定評あるNovaScreen社の伝統を引き継いで、PerkinElmer Discovery Services (PDS)として薬理アッセイの受託サービスを提供し、両社を組み合わせた総合的創薬受託サービスを提供可能です。

株式会社パーキンエルマージャパン
ライフサイエンス事業部
www.perkinelmer.co.jp

本製品のお問い合わせ
本　社　〒240-0005 横浜市保土ケ谷区神戸町134 横浜ビジネスパーク テクニカルセンター 4F TEL.(045)339-5862
大阪支社　〒564-0051 大阪府吹田市豊津町5-3 TEL.(06)6386-1771
東京営業所　〒101-0024 東京都千代田区神田和泉町1-7-17 CTKビル 5F TEL.(03)3866-2647
九州営業所　〒812-0013 福岡市博多区博多駅東1-12-6 花村ビル 2F TEL.(092)474-2311

PerkinElmer
For the Better

パーキンエルマーは、
装置、試薬・消耗品、ソフトウエアと独自のアッセイ技術で、
創薬の No.1 ソリューションプロバイダー を目指します。

RI & non-RI Homogeneous Assay , Label Free , Biochemical assay, Cell based assay , Phenotype assay, Mobility Shift assay, Epigenetics・Kinase & GPCR , High Content Analysis , Data Analysis and visualization, Lab Automation, Chemical Library, Assay Service, Profiling service & Custom

株式会社 パーキンエルマージャパン
ライフサイエンス事業部

www.perkinelmer.co.jp

本製品のお問い合わせ

本　社　〒240-0005 横浜市保土ケ谷区神戸町134 横浜ビジネスパーク テクニカルセンター 4F TEL.(045)339-5862
大阪支社　〒564-0051 大阪府吹田市豊津町5-3 TEL.(06)6386-1771
東京営業所　〒101-0024 東京都千代田区神田和泉町1-7-17 CTKビル 5F TEL.(03)3866-2647
九州営業所　〒812-0013 福岡市博多区博多駅東1-12-6 花村ビル 2F TEL.(092)474-2311

PerkinElmer
For the Better

みずほ情報総研スポンサードセッションのご案内

～In silico 創薬へのFMO法の活用：MIZUHO/BioStationの最新機能と解析事例～

MIZUHO/BioStation は、フラグメント分子軌道（FMO）法に基づいてタンパク質などの大規模分子の電子状態計算や相互作用解析を可能にした量子化学計算プログラムパッケージであり、計算エンジン ABINIT-MP と専用可視化プログラム BioStation viewer から構成されています。FMO 法により計算された電子状態計算結果を可視化して直感的に用いることが可能であり、リガンド化合物とタンパク質との相互作用を官能基単位で定量的に評価することができるため、創薬における分子設計に有用な知見を得ることができます。

今回、2013 年度生命医薬情報学連合大会の場をお借りして、12 月にリリース予定の新バージョン MIZUHO/BioStation 3.0 についてご紹介いたします。基調講演としてホウ素創薬の最前線でご活躍されている中村先生をお迎えした後、合成ホウ素化合物とキナーゼとの相互作用への FMO 法適用事例をご紹介します。また、FMO 法の特徴であるフラグメント間相互作用解析(IFIE)を各エネルギー成分（静電力、交換反発力、電荷移動力、分散力）に分割する新機能「PIEDA」の紹介と、タンパク質－リガンド相互作用解析例についてご説明いたします。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

【スポンサードセッションの内容】

1．タイトル　「In silico創薬へのFMO法の活用：MIZUHO/BioStationの最新機能と解析事例」

2．日時　10月31日（木）13:30-15:00

3．場所　東京・タワーホール船堀 2階 福寿

4．プログラム

13:30-14:05　基調講演「ホウ素創薬の最前線」
東京工業大学 資源化学研究所 教授
中村 浩之 先生
ボルテゾミブが世界初のホウ素医薬として多発性骨髄腫の治療薬に承認されて以来、ホウ素創薬が注目されてきています。本講演では、ホウ素創薬研究の現状と、今後計算化学に期待される技術について解説していただきます。

14:05-14:35　「ABINIT-MP/BioStationによるFMO法の計算事例」
みずほ情報総研株式会社 サイエンスソリューション部
マネージャー 福澤 薫
FMO法を用いた、合成ホウ素化合物とEGFRチロシンキナーゼとの相互作用解析や新機能「PIEDA」の適用事例についてご紹介します。

14:35-15:00　「MIZUHO/BioStation 3.0の機能紹介と操作説明」
みずほ情報総研株式会社 サイエンスソリューション部
コンサルタント 塚本 貴志
MIZUHO/BioStation 3.0の機能説明とPIEDA新機能のご紹介、計算解析のためのGUI操作方法についてご説明いたします。

バイオ分子相互作用シミュレータ
MIZUHO/BioStation

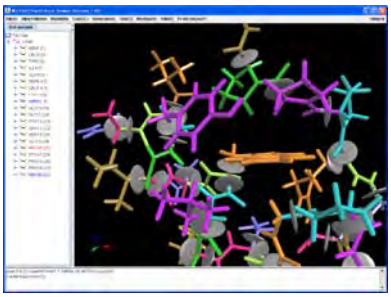
2013年12月に新機能「PIEDA」を含むver.3.0をリリース予定

MIZUHO/BioStationは、タンパク質などの大規模分子の電子状態計算や相互作用解析を可能にしたフラグメント分子軌道（FMO）法に基づく量子化学計算ソフトウェアです。FMO法計算の入力ファイル作成やフラグメント分割などのプリ処理から、フラグメント間相互作用エネルギー（IFIE）解析、軌道相互作用解析（CAFI、FILM）などのポスト処理までをサポートする充実したユーザーインターフェースを有しております。みずほ情報総研は、MIZUHO/BioStationの販売、解析コンサルティング、カスタマイズ等のサービスを通じて創薬分野における分子設計を支援いたします。

【MIZUHO/BioStation の特徴】

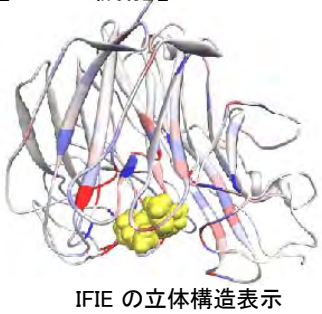
- **FMO 法を用いた大規模分子の電子状態計算および相互作用解析が可能**
- **MP2 法を始めとする高次電子相関手法が利用可能**
- **MP2 レベルの部分構造最適化計算が可能**
- **フラグメント間相互作用、軌道相互作用、電荷分布等、計算結果の豊富な解析機能**
- **FMO4 計算に基づく 4 体補正まで考慮したフラグメント間相互作用解析が可能**
- **フラグメント分割等の入力処理をGUIによりサポート**
- **エネルギー分割手法「PIEDA」を搭載（ver 3.0 新機能）**

【プリ機能】



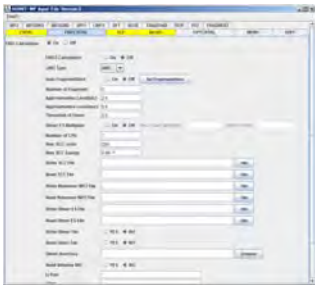
フラグメント分割処理例（主鎖および側鎖）

【ポスト機能】

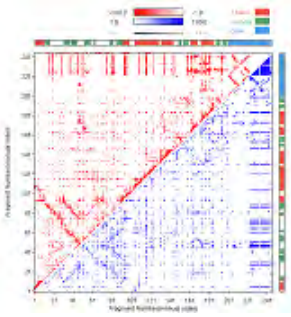


IFIE の立体構造表示
（インフルエンザウイルスタンパク質とタミフル）

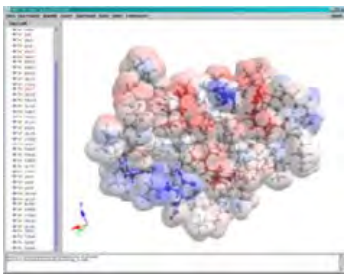
VISCANAによる相互作用パターン解析



入力パラメータ設定画面



IFIE mapによる網羅的解析



静電ポテンシャルマップ

SCIENCE SOLUTION

お問い合わせ・資料のご請求　みずほ情報総研株式会社　サイエンスソリューション部
〒101-8443 東京都千代田区神田錦町二丁目 3 番地
URL　http://www.mizuho-ir.co.jp/solution/research/life/macromolecule/biostation
e-mail　ss-toiawase@mizuho-ir.co.jp　Tel 03-5281-5311

CBI 学会 2013 年大会-生命医薬情報学連合大会-スポンサードセッション

日本動物実験代替法学会（JSAAE）協賛シンポジウム
日時：2013 年 10 月 31 日（木）　13：30－15：00
会場：タワーホール船橋　福寿（2F）

---

in vitro 試験と代替法をつなぐ計算毒性学の立ち上げ

オーガナイザー
石田 誠一　（国立医薬品食品衛生研究所）　-JSAAE
湯田 浩太郎（株式会社　インシリコデータ）-JSAAE

動物実験代替法学会における取り組みの紹介

Research approaches in the Japanese Society for Alternatives to Animal Experiments

竹澤 俊明 Toshiaki Takezawa, Ph.D.
独立行政法人　農業生物資源研究所　動物科学研究領域
Division of Animal Sciences, National Institute of Agrobiological Sciences

日本動物実験代替法学会（http://www.asas.or.jp/jsaae/）では、動物実験の適切な施行の国際原則である３Rs【Replacement（動物を用いない代替法への置換）、Reduction（動物数の削減）、Refinement（動物に対する苦痛軽減）】の推進と普及を目的として、研究、開発、教育、調査等を行っている。本講演では、その概略を紹介するとともに、特に動物を用いない「In vitro 試験法」における計算毒性学の必要性については、自らの研究から言及したいと考えている。

---

in silico の予測系の概説と代替法への橋渡し

Technology development for database integration to make use of huge amount of public biological data in DBCLS

湯田　浩太郎 Kohtaro Yuta, Dr. of Pharmacy
株式会社　インシリコデータ
In silico data, Ltd.

動物愛護の観点での３Ｒの理念に基づく動物実験禁止は、化粧品関連分野に大きな変化を強いている。この流れは医薬品や機能性化合物開発分野にも影響し、実験動物の使用を少なくする努力が求められている。

In silico による予測は予測項目の違いにより様々なアプローチが展開されてきた。中でも、毒性予測は動物実験禁止のみならず、創薬研究の ADME/T の観点で重要となり、機能性化合物では化合物規制や環境の観点でその重要性が急速に拡大している。

In vitro による動物実験代替法の内容的特徴は、in silico 毒性予測に類似する。従って、in silico 技術の動物実験代替法上での展開は、in silico 毒性予測技術が基本となる。

本講演では in silico による毒性予測の基本と概要を俯瞰し、この技術を代替法上で展開する場合のシステム上での課題とその効果等について議論する。

反復投与毒性評価支援システムＨＥＳＳの開発

Development of HESS system for supporting the evaluation of repeated dose toxicity

櫻谷 祐企 Yuki Sakuratani, Ph.D.
独立行政法人製品評価技術機構 化学物質管理センター
Chemical Management Center, National Institute of Technology and Evaluation（NITE）

有害性評価支援システム統合プラットフォーム（HESS）は、試験データがない化学物質の反復投与毒性を類似物質の試験データから推定することを支援するシステムとして NEDO 及び経済産業省のプロジェクトで開発され、NITE のウェブサイトから無料で公開されている。HESS の DB には、化審法の既存化学物質を中心とした反復投与毒性試験データの詳細情報と、これらの物質に関連する毒性メカニズムの情報（*in vitro* 等）や代謝の情報（*in vivo*/*in vitro*/*in silico* 等）が収載されている。HESS の解析ツールは、OECD の QSAR Toolbox と互換性を持った仕様となっている。評価者は、HESS の解析ツールにより、最適な類似物質を効率良く探索することができ、HESS DB の情報によりその根拠を確認することできる（毒性のメカニズムが類似することを示すデータ等）。評価対象物質の反復投与毒性は、類似物質の毒性強度の分布に基づき、Read-across 等の手法により推定することができる。本発表では、HESS の概要と具体的な使用例を紹介する。

インビボ毒性データベースとインビトロ試験を利用した化学物質の肝毒性の機序解明、評価、予測

Mechanistic analysis, evaluation and prediction of chemical-induced hepatotoxicity using in vivo toxicity database and in vitro assays

吉成　浩一 Kouichi Yoshinari, Ph.D.

東北大学大学院薬学研究科　薬物動態学分野

Division of Drug Metabolism and Molecular Toxicology, Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Tohoku University

化学物質の安全性は従来動物試験で評価されてきたが、開発の効率化や動物愛護の観点から代替試験法の開発が強く求められている。これまでに、化学構造に着目したインシリコ手法、毒性標的分子を利用したインビトロ試験などによる評価・予測手法の開発が試みられている。しかし、化学物質の安全性評価において重要な反復投与毒性や発がん性については、代替試験法の開発は進んでいない。これら毒性の発現機序が非常に複雑であることがその理由の１つと考えられる。我々は、毒性試験データベースを有効に活用することで、インビトロ試験とその結果の情報科学的解析により、化学物質の毒性発現機序の解明や毒性予測が可能になるのではないかと考え、研究を進めている。本セッションでは、複数の異物応答性転写因子のインビトロ試験と薬物代謝予測およびそれらの情報科学的解析を利用したラット反復投与肝毒性の評価・予測に関する我々の取り組みを紹介する。

---

in vitro 試験と代替法をつなぐ計算毒性学の立ち上げ

Launch of the computational toxicology connecting alternative methods for animal tests and in vitro toxicity tests

石田　誠一 Seiichi Ishida, Ph.D.

国立医薬品食品衛生研究所　薬理部

Division of Pharmacology, National Institute of Health Sciences

医薬品等の安全性評価では、本年 3 月 11 日から執行された欧州における化粧品原料に対する動物実験の全面禁止に見られるように、動物実験の代替が急がれている。また、近年は、毒性発現の作用機構に基づく評価が求められている。一方で、オミクス解析やハイコンテントアナリシスなどの発展に見られるように、安全性評価でも比較的大規模のデータを扱う試験系が用いられるようになってきている。本セッションのまとめとして、大量データの処理に必要なインフォマテクス技術を新たな試験系と融合させることにより、従来の動物試験では実現できなかったヒトに近い安全性予測モデルの開発の可能性と期待について議論をしたい。

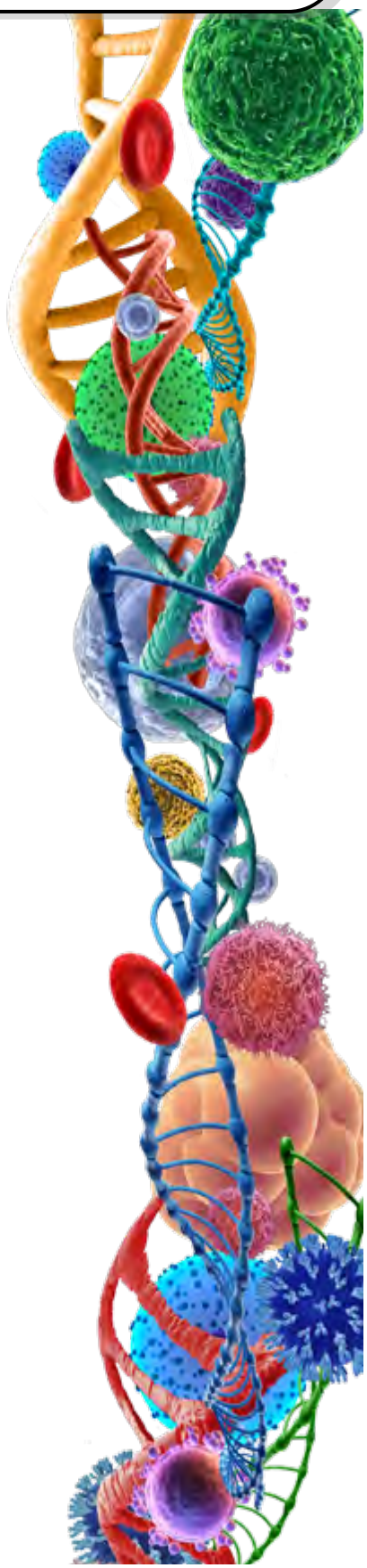
2013 年日本バイオインフォマティクス学会年会

ライフテクノロジーズジャパン株式会社ランチョンセミナー

10 月 29 日　火曜日　12:00–13:00　タワーホール船堀　401

life technologies™

Translational Cancer Genomics Solutions



Learn how Life Technologies leverages years of cancer genomic experience, Oncomine™–enabled research capabilities, and bioinformatics expertise to help address key drug development and cancer research challenges including:

- Novel target discovery and validation
- Selection of patient populations
- Identification of predictive genomic biomarkers
- Characterization of molecular subtypes of disease
- Integrated analysis of new and emerging data types including NGS and their application to these goals

Exploratory areas of ongoing research including building an understanding of the impact of co-occurring genetic aberrations, identification of combination opportunities and identification and characterization of clinically relevant models for discovery research will also be addressed.

Presented by:

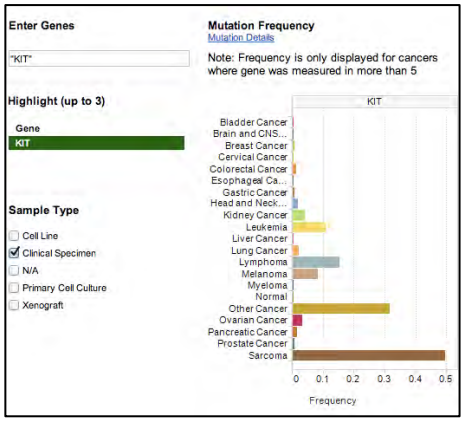
Emma T. Bowden, PhD

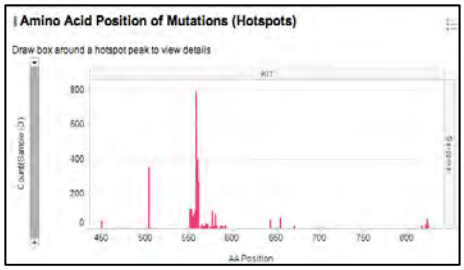
Director, Translational Medicine
Life Technologies

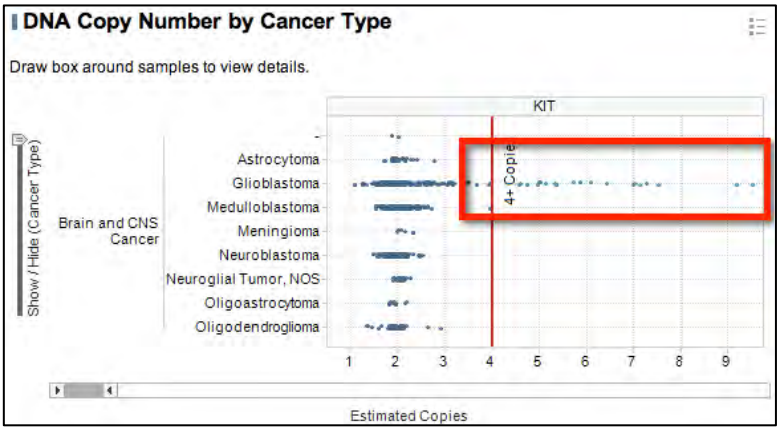
【新製品】 Oncomine® Gene Browser

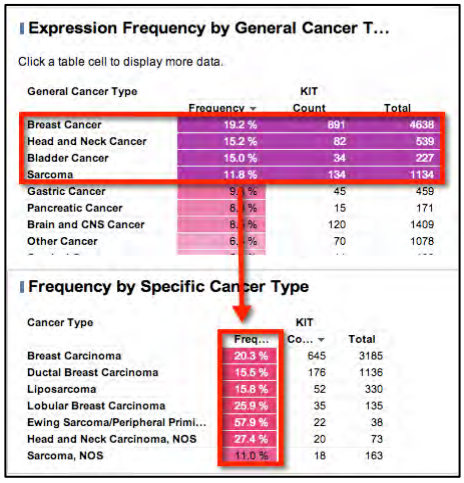
life technologies™

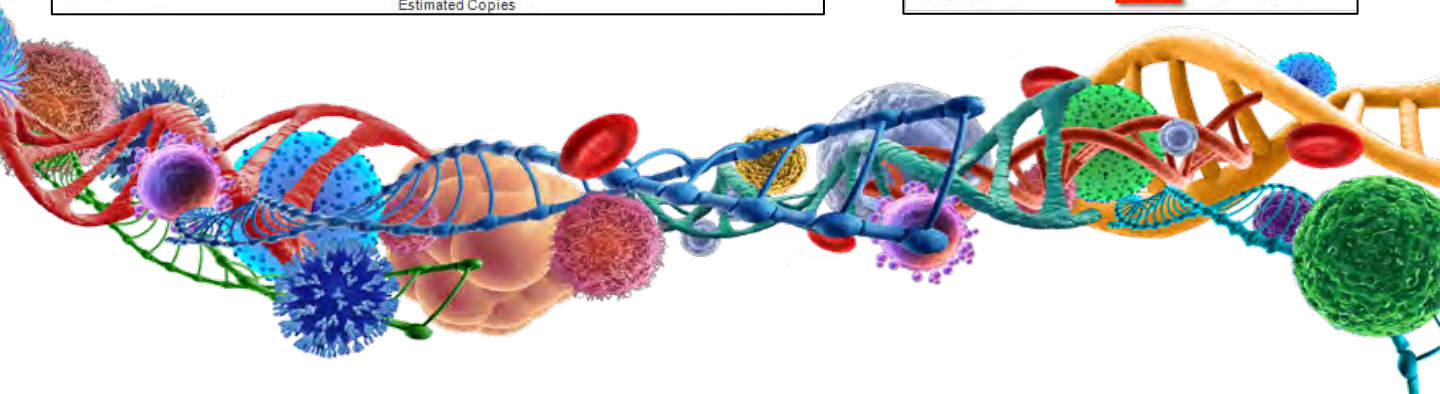
- Profile critical targets and biomarkers across thousands of cancer patients genomes
- Prioritize targets based on mutations, copy number, & differential expression
- Identify cancer types where specific biological mechanisms are active
- Rapid evaluation of cancer gene targets across millions of dollars in experiments over the web, instantly











DNA CHIP RESEARCH INC.

日本バイオインフォマティクス学会 2013年年会

株式会社ＤＮＡチップ研究所
【ランチョンセミナー】

大量配列解析の周産期疾患への応用

日時　2013年 10月 29日（火）　12：00～13：00

会場　タワーホール船堀　4階　407

独立行政法人　国立成育医療研究センター研究所
周産期病態研究所
秦　健一郎 先生

生殖異常や発生異常に関わる遺伝因子は、一般的に淘汰されやすく、大家系を形成することが稀なため、従来遺伝学的な解析は難しいと考えられてきた。
一方でこれらの疾患は、慢性疾患と比較すると、環境因子の影響の程度は小さいと推測される。
本セミナーでは、大量配列解析機器を応用した周産期疾患のゲノム解析・エピゲノム解析を紹介するとともに、今後の展望（この分野の医師・研究者が解析の際に困っていること）を示す。

株式会社ＤＮＡチップ研究所

DNA CHIP RESEARCH INC.

次世代シークエンス解析 受託サービス

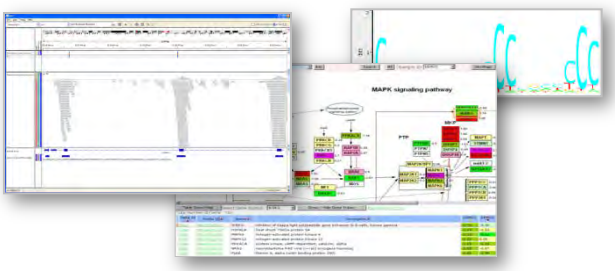
実験計画のお手伝いから、実験、統計解析、論文用作図など専門のスタッフが細やかにサポートいたします。DNAチップ研究所には研究開発で培った豊富な経験とノウハウがあります。

- エクソーム解析（SureSelect）
- ChIP seq
- メチル化DNAシークエンス
  - MeDIP seq
  - hMeDIP seq
  - SureSelect Human Methyl-seq
- ターゲットリシークエンス
  - Cancer Panel
  - HaloPlex
  - SureSelectカスタム濃縮
  - TruSeqカスタムアンプリコン
- RNA seq
  - mRNA seq
  - mRNA seq -微量サンプル-
  - Strand Specific mRNA seq
- Small RNA seq
- その他
  - PCR増幅サンプル
  - de novo解析（微生物）
- 各種ライブラリ調整、シークエンス、データ解析
  - 様々なライブラリの調整に対応
  - HiSeq、MiSeqを使用
  - ライブラリ調整、データ解析のみでも承ります

体細胞変異検出

500pg~

おすすめ



ＤＮＡマイクロアレイ、リアルタイムPCR受託も承っております。

株式会社ＤＮＡチップ研究所

所在地　〒230-0045 神奈川県横浜市鶴見区末広町1-1-43
Tel　（代表）045（500）5211　（営業）045（500）5225　（技術サポートセンター）045（500）5218
URL　http://www.dna-chip.co.jp/　E-mail　dnachip-support@dna-chip.co.jp

MiSeq® あなたの求める次世代シーケンサー

ベンチトップ型次世代シーケンサーに求められるのは、高い精度とパフォーマンス。
イルミナがそれを実現します。次世代シーケンサーで唯一の自動化装置のMiSeq
は、始まりから終わりまでのトータルソリューションを提供します。
世界のシーケンスデータの90%以上を産出する実力。それがイルミナです。

illumina®

www.illuminakk.co.jp/miseq/

イルミナ株式会社　〒 103-0025 東京都中央区日本橋茅場町 2-13-13　TEL:(03)4578-2800　e-mail:JPN-Sales@illumina.com

生命医薬情報学連合大会 2013
【ランチョンセミナー】

日 時：10月30日（水） 11:30〜12:30
会 場：タワーホール船堀　407（4階）

イルミナ次世代シーケンサーアップデートと臨床応用への課題

鈴木 健介　イルミナ株式会社 マーケティング部シーケンススペシャリスト

2012年から発売を開始し、約1日でヒトゲノムを解析できるスピードとデータ出力を備えるHiSeq2500は様々な研究分野で幅広く応用されています。また2011年に登場したデスクトップ型次世代シーケンサーMiSeqは、ランあたり1Gbのデータ出力が、昨秋のバージョンアップでランあたり8Gbのデータ量、250塩基のリード長となりました。さらに今秋MiSeqは更なる進化をみせ、ランあたり15Gbのデータ量、300塩基のリード長、5000万のリード数を達成し、デスクトップ型次世代シーケンサーの枠を超える優れたパフォーマンスをお届けしています。

イルミナシーケンサーの進化により、サンプル調製、データ解析といったシーケンス前後の解析工程の改善が強く求められています。イルミナはシステムの開発だけではなく、サンプル調製、データ解析の革新をもたらすべく開発を進めています。サンプル調製では低バイアスを追求したPCRフリーのサンプル調製キット、Nexteraテクノロジーを用いた迅速なエクソーム解析キットをリリースし、ロングリードアプリケーションを可能にするMoleculoテクノロジーによる受託サービスも開始いたしました。データ解析においてはクラウドサービスBaseSpaceが更に充実し、高速なアライメントと変異解析を可能にするIsaacをリリースしました。

本セミナーでは、イルミナ製品の最新情報をお届けすると共に、今後の開発の方向性と、今後の臨床応用に向けて解決するべき課題についてご紹介いたします。

生命医薬情報学連合大会（JSBi年会）
（ＣＢＩ学会、日本バイオインフォマティクス学会、オミックス医療研究会）

■日時：１０月３１日（木）12：00-13：00
■場所：タワーホール船堀　401 会議室（63 名定員）
　　東京都江戸川区船堀４−１−１

■ランチョンセミナー
「次世代医療を支える大規模シーケンシングとインフォマティクス」

■主催
NGS 現場の会、三井情報株式会社

■セミナー概要
ゲノム解析の成果を基にした個別化医療実現に向けた取組みが癌治療等の分野で進められています。この次世代医療を支えているのは Next Generation Sequencing(NGS)分野の技術革新と、そこから発生する大規模シーケンシングデータの解析であり、それらは急速な発展期を迎えています。
本セッションでは、知識やノウハウのアップデートと現場関係者での共有を目的にコミュニティ活動を行っている NGS 現場の会と共に、大規模シーケンシングにおける課題をディスカッションします。

■座長：
渡辺　亮（京都大学 iPS 細胞研究所 CiRA ゲノム・エピゲノム解析コアファシリティ（山中研究室渡辺グループ）　特定拠点助教）

■プログラム
１）12:00-12:10　セッション概要
本セミナーの概要と MKI の取り組み
奥村　利幸（三井情報株式会社 R&D センター バイオサイエンス室 室長）

２）12:10-12:35　（NGS 現場の会より）
タイトル：高深度全ゲノムシーケンシング解析の現状と課題
所属・氏名：東北大学メディカル・メガバンク機構　ゲノム解析部門
教授　長﨑 正朗

東北メディカル・メガバンク機構では次世代の予防医療をめざしゲノムコホート事業を推進しています。本事業の中で現在行っている千人規模の高深度全ゲノムシーケンシング解析の現状と課題および本機構の方向性について話題提供を行います。

３）12:35-13:00　（NGS 現場の会より）
タイトル：次世代医療時代における高速シーケンシングとデータ解析の課題
所属・氏名：京都大学 iPS 細胞研究所　初期化機構研究部門
特定拠点助教　渡辺　亮

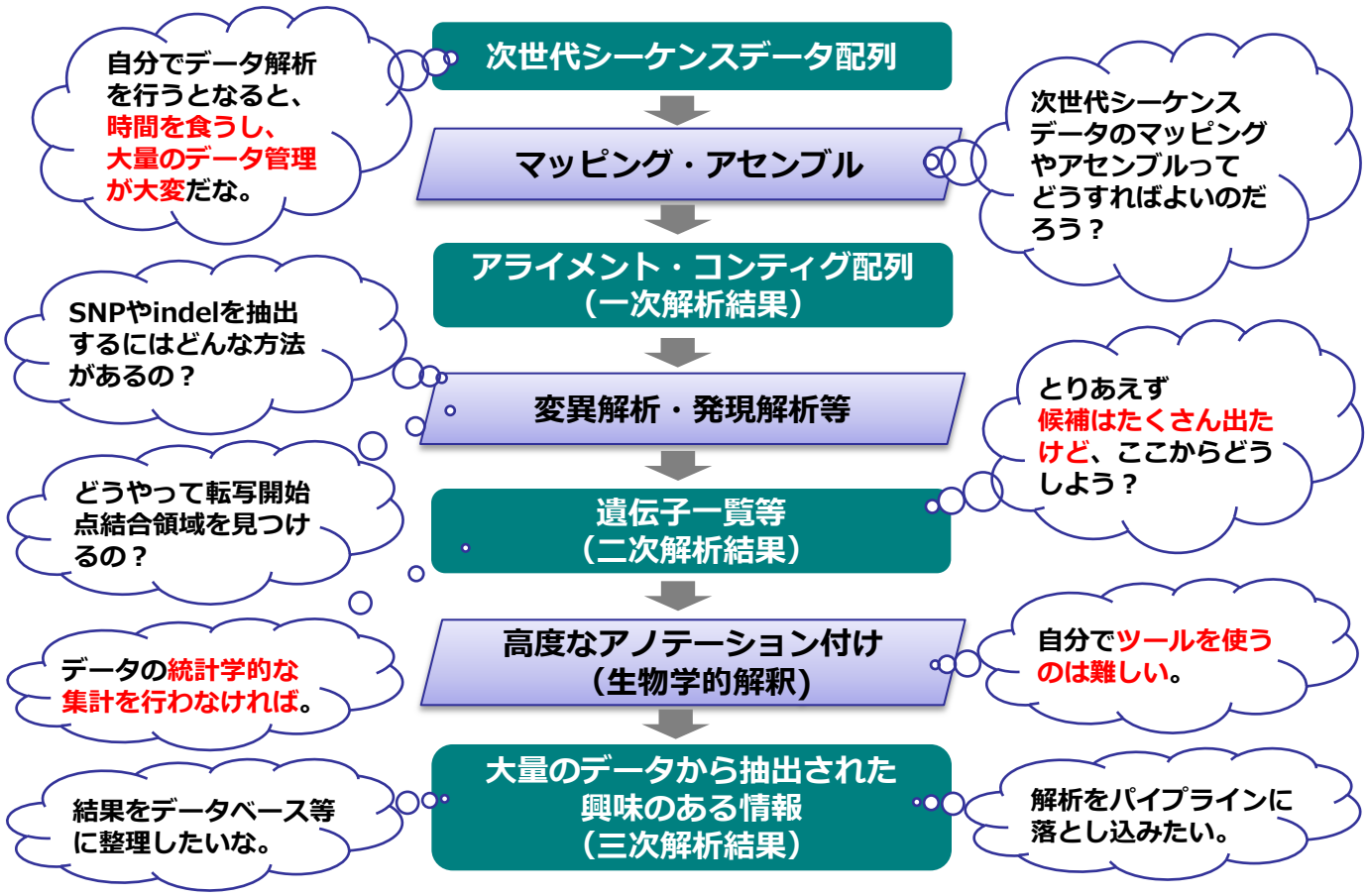
iPS 細胞を用いた再生医療の実現に向けて、次世代医療という位置づけの中でゲノムシーケンシングを細胞の「品質管理」として活用する試みについて紹介し、現時点での問題点についてディスカッションします。

次世代シーケンスデータ解析の心強いサポート

「次世代シーケンスデータ解析サービス」

新たな成長を、あなたとともに。

次世代シーケンスデータ解析では、大量のデータから興味のある情報だけを抽出するまでに、下記のような様々な悩みや問題が生じるかと思われます。そのような場合はぜひ、MKIの次世代シーケンスデータ解析サービスをご活用ください。「自分の研究の場合どのようなデータ解析を行うことになるのか」など、お客様のケースに合った解析ができるようご相談に応じさせて頂きます。



データ解析手法

◆基本解析
- de novoアセンブル ・遺伝子領域予測
- マッピング ・多型/変異解析
- 発現解析/頻度解析 ・融合遺伝子解析 その他

◆高次解析
- パスウェイ解析
- タンパク質立体構造予測
- GWAS ・構造変異解析（CNV等）
- cancer mutation判定, その他

◆その他
- メタゲノム解析結果DB構築

データ解析例

研究目的	解析手法
がん原因遺伝子変異探索	変異解析、タンパク質立体構造解析、パスウェイ解析、他
未分化細胞のマルチオミクス解析	NGS解析、エピゲノム解析、トランスクリプトーム解析、他
植物のGWAS・構造変異解析	GLM、MLM、GWASパイプライン作成、他

※上記サービスについての詳細はお問合わせください

その他取り扱い製品の詳細はこちらをご覧ください。
http://www.mki.co.jp/biz/solution/bio/index.html

三井情報株式会社
MITSUI KNOWLEDGE INDUSTRY

R&Dセンター バイオサイエンス室

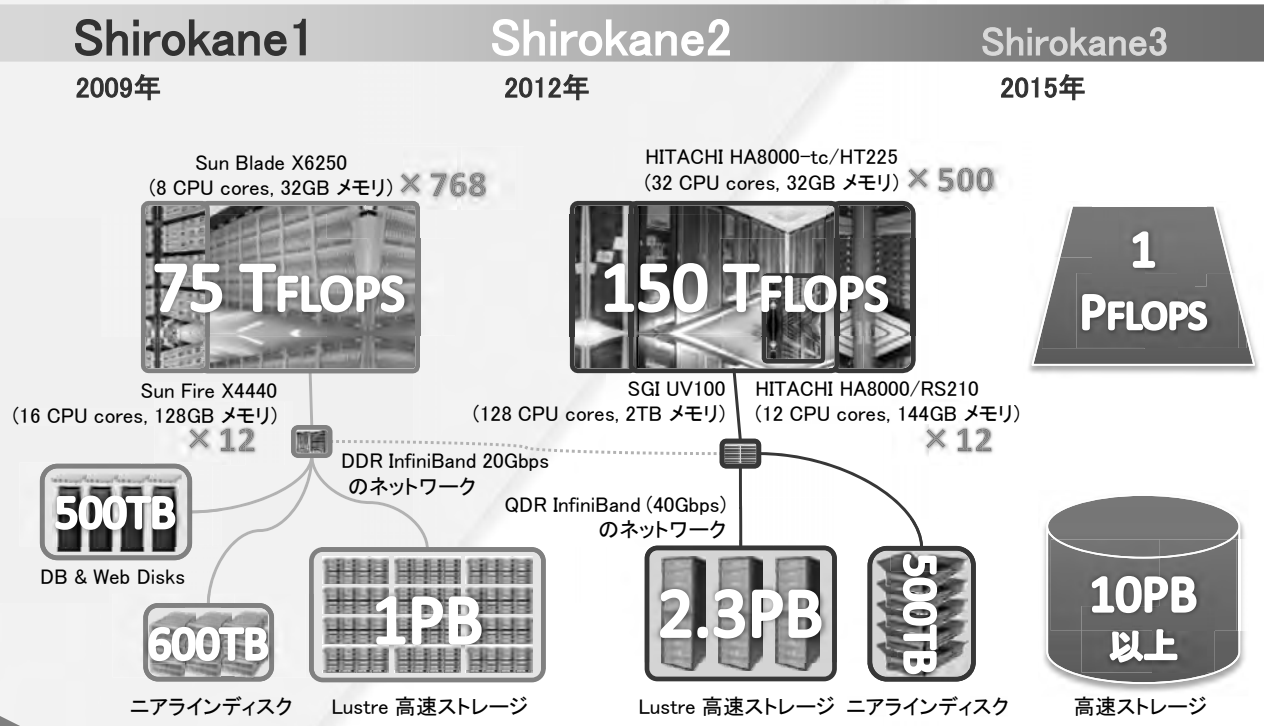
〒105-6215 東京都中野区東中野2-7-14
TEL：03-3227-5559 FAX：03-3360-1730
E-Mail ： bio-webinfo@ml.mki.co.jp URL：http://www.mki.co.jp/

■ 記載の会社名、製品名は、それぞれ各社の商標および登録商標です。
■ 本広告に記載の内容は予告なしに変更する場合があります。
■ 本広告に掲載の記事、写真、図表の無断転載を禁じます。

Human Genome Center
the Institute of Medical Science, the University of Tokyo

ヒトゲノム解析センター（HGC）スーパーコンピュータシステム

ヒトゲノム解析センター（HGC）のスーパーコンピュータSHIROKANEは、2つのシステムによる、ライフサイエンス分野専用として、国内最大の演算性能を持つスーパーコンピュータです。



来年度1月稼動予定の Shirokane3（仮称）は、利用者のニーズに見合ったスペックの提供を考えています。

http://www.hgc.jp

HGCスーパーコンピュータに関するご質問は、
下記の連絡先にお願いします

〒108-8639 東京都港区白金台 4-6-1
東京大学医科学研究所 ヒトゲノム解析センター
☎ 03-5449-5620 ✉ support@hgc.jp

ヒトゲノム解析センター(HGC)
オーガナイズドセッションのご案内

このセッションでは、HGCスーパーコンピュータと
スーパーコンピュータを利用した研究成果をご紹介します

日時・場所

10月29日（火）14:00～15:30
タワーホール船堀 401

セッション

I 「ゲノム医療の明日を切り開く ヒトゲノム解析センター スーパーコンピュータシステム」

ゲノム医療におけるHGCスパコン
システムの役割をご説明します

II 「東大HGCスパコンを用いた ヒトの全ゲノムシークエンス解析」

理化学研究所
ゲノム医科学研究センター
情報解析研究チーム
上級研究員 **藤本 明洋** 氏

III 「スーパーコンピュータを利用した がんゲノムシークエンス解析」

国立がん研究センター研究所
がんゲノミクス研究分野
ユニット長 **十時 泰** 氏

HGCスーパーコンピュータの特長

- ◆ 次世代シークエンス解析を支援するパイプラインを整備しています
- ◆ 大容量のメモリを必要とする解析プログラムの実行にも対応します
- ◆ パソコンやワークステーションより高い演算性能と大容量で高速並列アクセスができるディスク領域により、大規模に同時並行のシークエンス解析が可能です
  - ✓ 多くのジョブを同時に実行可能です
  - ✓ 大量のディスクI／Oを必要とするアプリケーションを高速に実行可能です
  - ✓ 数ギガバイト～数テラバイトのデータに高速アクセスが可能です
- ◆ GenBank 等の各種配列データベースをミラーデータベースとして設置しているため、スパコンシステム内から低レイテンシで利用できます
- ◆ シミュレーションや解析などで必要なソフトウェアはインストールを承ります（インストールは申請に基づくもので、審査があります。基本的にフリーウェアに限ります）
- ◆ Linuxの基本操作やシステムについての問合せなどに随時サポートしています。どうぞご質問をお寄せください

DBCLS presents…

Database Center for Life Science

Open Science Award & BioHack Competition

表彰式@JSBi2013年年会
ところ：タワーホール船堀　小ホール
とき：10/31 (木) 10:30-12:00

Open Science Award

DSW48 総選挙！センターを目指せ！

- Dチーム - データベース部門
- Sチーム - ソフトウェア部門
- Wチーム - ウェブ部門（ツイート部門）

日々ありがたく使っている（国内の）データベース・ソフトウェア・ウェブサイト（ブログやWikiなど）をコミュニティで表彰します。ノミネートされた作品に対してみなさんに投票していただき、「講演を聞きたい！」という得票の多い作品について JSBi 年会で表彰し、作者に発表していただく予定です。講演者は生命医薬情報学連合大会へご招待します。豪華賞品も!?
投票期間：９月１日～３０日
投票サイトはこちら(http://g86.dbcls.jp/jsbi/vote)

BioHack Competition

下記に提示されたお題にもとづく開発コンペを同時に開催します。クイックハックでインパクトのある作品を作って応募してください。Open Science Awardと同時に表彰します。
こちらの賞品も乞うご期待!?
応募期間：９月３０日まで
エントリーはこちら(http://g86.dbcls.jp/jsbi/hack)

- Semantic Web 部門 - そこらの SPARQL エンドポイント（UniProt など）を使って超絶技巧クエリを作ろう！（アプリも可）
- Illumina 部門 - BaseSpace (Ruby) SDK で次世代アプリを作ろう！（安易なのも可）
- テキストマイニング部門 - 新機軸の発想でクールなデータを作ろう！
- Excelハック部門 - バッドノウハウ大集合
- なんでも部門 - 上記以外の全て

Open Science Award/BioHack Competition 開催趣旨

データベースやそれらを利用する技術は、日々の研究に欠かせない存在になっているにも関わらず、新規発見を重視する傾向のある「論文」にはなかなかなりにくいため、データベース構築の作業は後回しにされがちで、それ自体が成果として取り上げられることも多くありません。そのためにせっかくの貴重なデータが陽の目を見ることなく、有効活用されないまま死蔵されてしまうことも多くありました。

私たちライフサイエンス統合データベースセンター（DBCLS）は、このようなツールやデータベースに関する技術開発を自ら行うとともに、すでに世の中に有って役立つものは、研究者コミュニティに広めてさらに活用してもらうこともミッションの一つとしています。そのためにこれまで

・統合TV（http://togotv.dbcls.jp/ja/）
・AJACS講習会（http://motdb.dbcls.jp/?MotDB）

等において、様々なデータベースやツールの使い方の紹介をしてきました。

今回は、研究者コミュニティから広く意見をいただいて、実際に多く使われ、役立つデータベースやツール、ウェブサイトの紹介を、作成者ご本人にしていただく機会を作りたいと、Open Science Awardを設けました。また、データベースやその利用ツール等に対して興味を持っていただき、積極的に利用するきっかけとなれるような、開発コンペBioHack Competitionも同時に開催します。たくさんのご応募お待ちしております。

データベース統合におけるDBCLSの役割

ライフサイエンス統合データベースセンターは、所在が不明である、使い方が分からない、などライフ分野のデータベースの抱える多くの問題を解消し、データベースが統一的統合的に使えるようにすることを目的として平成１９年４月に設立されました。これまで、多くの統合化技術を開発するとともに、それに基づく種々のサービスを提供してきました。平成２３年４月に文部科学省の統合推進事業体制が変更されたのに伴い、技術開発により特化した組織になりましたが、これからもライフ分野の知的情報基盤の構築に邁進します。

生命医薬情報学連合大会　http://biomedpharminfo.org/
JSBi2013年年会　http://jsbi2013.hgc.jp/
DBCLS　http://dbcls.rois.ac.jp/

DBCLS
Database Center for Life Science

生命医薬情報学連合大会
日本バイオインフォマティクス学会2013年年会 オーガナイズドセッション

「京速スーパーコンピューティングと創薬」

オーガナイザー：田中正夫、坂田恒昭
（大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCI 戦略分野 1
「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム）

日時：平成 25 年 10 月 31 日（木）10：00-11：30
場所：タワーホール船堀　401 会議室　東京都江戸川区船堀４－１－１

セッション概要

スーパーコンピューター「京」が 2012 年 6 月に完成して、ほぼ 1 年半になる。この間に「京」を用いての製薬産業への応用の試みが種々になされている。特に膨大な蛋白質と化合物のデータを用いての医薬品の標的ターゲットと医薬品のドッキングシュミレーションや、より精緻な分子構造に基づくドッキングシュミレーションが、今まで膨大な時間と資金を要していた創薬への新しい扉を開くものと期待されている。

本セッションでは、計算化学の世界を開くスーパーコンピューター「京」の産業利用、特に創薬分野における現状と今後について紹介する。

司会：坂田恒昭（大阪大学 大学院基礎工学研究科 特任教授）
松田秀雄（大阪大学 大学院情報科学研究科 教授）

プログラム

１）10:05-10:30

「製薬コンソーシアムで挑むスパコン創薬」

京都大学大学院薬学研究科　システム創薬科学　教授　奥野恭史 氏

概要：スパコン「京」の始動をきっかけに、演者らは製薬会社 11 社と IT 会社 2 社との産学コンソーシアムを形成し、スーパーコンピューティングによる次世代創薬計算に挑戦しています。本講演では、我々の取り組みの紹介を通じて、医薬業界におけるスパコン「京」のインパクトをお示します。

２）10:30-10:55

「インシリコ創薬に向けた標的タンパク質モデリングからのアプローチ」

三井情報株式会社 R&D センター バイオサイエンス室　佐藤美和 氏

概要：「京」の産業利用とインシリコ創薬基盤構築に向けて、奥野教授を代表とするプロジェクトが始動しています。本プロジェクトにおける、標的タンパク質のモデリングから化合物の活性値予測まで、具体的な取り組みと成果について紹介します。

３）10:55-11:20

「創薬の現場からみたスーパーコンピューティングと計算化学」

塩野義製薬株式会社　創薬・探索研究所 創薬化学部門長 辻下英樹 氏

概要：弊社での創薬研究における計算化学の利用の現状と課題についてお話をさせていただき，そこから「京」をはじめとするスーパーコンピューティングの可能性，期待する点について議論させていただきます。

【御案内】

第６回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

日　時：2013 年 12 月 10 日（火）13:30-16:40
場　所：ステーションコンファレンス東京 ６０５
（東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー6 階）
参加費：無料（http://hpci.me.es.osaka-u.ac.jp/で事前登録をお願いいたします）

プログラム：

スーパーコンピュータ京に再現する心臓
東京大学 大学院新領域創成科学研究科 バイオメカニクス分野　杉浦清了氏

パーキンソン病における運動障害の数理モデルシミュレーション
大阪大学 大学院基礎工学研究科 生体工学領域　野村泰伸氏

医療ビッグデータの応用
塩野義製薬株式会社 解析センター　都地昭夫氏、北西由武氏

ひとつの薬を臨床に届けるまで - ある抗がん剤を例として
東京大学 創薬オープンイノベーションセンター 多田幸雄氏

※　講演題目は一部変更されることがあります。

問合先：大阪大学大学院基礎工学研究科　HPCI セミナー事務局
hpci@me.es.osaka-u.ac.jp

東北メディカル・メガバンク機構
TOHOKU MEDICAL MEGABANK ORGANIZATION

動き出した大規模ゲノムコホート計画：東北メディカル・メガバンクの挑戦的ゲノム研究

2013.10.31（木）13:30-15:00

オーガナイズドセッション

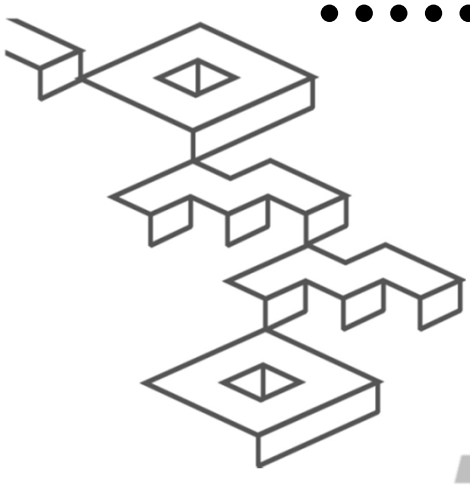
東北大学 東北メディカル・メガバンク機構は2012年より東北大学に発足し、被災地復興のために地域医療の復興、高度専門人材の育成、そしてゲノム解析や健康調査を含めた大規模コホート調査とバイオバンクの構築を柱に活動してきた。この一環として、1000人分のゲノムを解析することで、東北全ゲノムリファレンス・パネルを決定しようというプロジェクトが進行中である。本シンポジウムでは、1000人ゲノムプロジェクトの計画、その解析技術、及びバイオバンクのための情報基盤整備に関して東北大学で現場に携わっている先生方にご公演頂く予定である。また、最後に全体討論の時間を設けているので、東北メディカル・メガバンク機構に質問やコメントのある方はぜひ一言ご発言頂き、今後の日本のゲノム解析やバイオバンク事業に対する情報解析の役割等について議論を深めていきたい。

山下　理宇
東北大学 東北メディカル・メガバンク機構
ゲノム解析部門　准教授

東邦大学理学部生物学科卒業、奈良先端科学技術大学院大学バイオサイエンス研究科博士後期課程単位取得退学、東京大学情報理工学研究科　科学技術振興特任研究員、奈良先端科学技術大学院大学バイオサイエンス研究科　バイオサイエンス博士号取得、東京大学医科学研究所　ヒトゲノム解析センター　特任助手、東京大学医科学研究所　フロンティア研究拠点 ヒトゲノム解析センター　特任助教を経て現職に至る。

●●プログラム●●

13:30-13:35 初めに
　　山下　理宇　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構　ゲノム解析部門　准教授）
14:00-14:25「東北メディカルメガバンクの目指すものと全東北人1000人参照ゲノム計画」
　　安田　純　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構　ゲノム解析部門　教授）
14:25-14:50「全東北人1000人参照ゲノム計画関連のインシリコ解析の状況とバイオインフォマティクス」
　　長﨑　正朗　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構　ゲノム解析部門　教授）
14:25-14:50「新しい統合データベースとしてのバイオバンク開発」
　　高井　貴子　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構　医療情報ICT部門 准教授）
14:50-15:00 総合討論 & 次年度の生命医薬情報学連合大会の案内



東北大学 東北メディカルメガバンク機構とは

東北地方における東日本大震災からの地域医療の復興と未来型医療の実現を目指し、平成24年2月に、設立されました。当機構は、文部科学省のプロジェクト：東北メディカル・メガバンク事業を推進し、循環型医師支援制度による地域医療支援、住民の方々の長期健康調査と各種コホート事業、大型の公的バイオバンクの構築、次世代生命医療情報システムの開発、及びそのための高度専門人材の育成等を行います。過去の報告（2004年のスマトラ島沖地震など）の通り、震災後の被災地では、将来にかけて循環器疾患、感染症、PTSD（心的外傷後ストレス障害）等の増加が懸念されています。当機構は、被災地で地域の方々の健康調査を継続して行うことで、これらの疾患の早期発見と早期受診に役立てるとともに、未来の医療を切り開いていきたいと考えています。

山本　雅之
東北大学　東北メディカル・メガバンク機構　機構長

来年度大会は仙台で開催！

2014年の生命医薬情報学連合大会長を務めるのは、東北メディカル・メガバンク機構 機構長の山本雅之です。
今回までは、当大会、東京 船堀で開催されてきましたが、来年は仙台での開催を予定しております。皆様のお越しをお待ちいたしております。

人材募集中

現在東北大学 東北メディカル・メガバンク機構では人材を募集しています。募集職種は多種にわたります。最新の募集情報は、東北メディカル・メガバンク機構の人材募集のページをご覧ください。右記のQRコードもご利用ください。

ToMMo人材募集
QRコードはこちら

東北メディカルメガバンクの目指すものと全東北人1000人参照ゲノム計画

安田　純
東北大学　東北メディカル・メガバンク機構
ゲノム解析部門　教授

東北大学医学部卒、同脳神経外科入局 2年間の臨床修練、国立がんセンター研究所腫瘍遺伝子研究部（部長　関谷　剛男）に派遣され、基礎に転向、がんのゲノム解析を研究、米国マサチューセッツ大学医学部Roger J. Davis研究室に留学　細胞内シグナル伝達系の生化学、同大学のCraig C. Mello研究室（当時准教授、2006年ノーベル医学生理学賞受賞）とも共同研究し、RNAi技術に接する、国立がんセンター研究所病理部、理化学研究所横浜研究所　オミックス基盤研究領域チームリーダー、がん研究会がん研究所細胞生物部（東北大学COEフェロー）を経て現職に至る。

Tohoku Medical Megabank Organization (TOMMO) is a provisional research institute at Tohoku University. The mission of TOMMO is contribution to the restoration of medical activities and realization of advanced medicine in the regions damaged by the great eastern Japan earthquake occurred in 2011. TOMMO has three large activities: providing the medical aids, prospective genome cohort study recruiting 150,000 individuals with biobank, and establishment of infrastructure of medical informatics. Finally, we hope to establish the personalized medicine based on the individual's genomic sequences based on the whole genome analyses of the cohort participants. TOMMO will perform genomic and omics research using the specimens stored in the biobank to identify genetic markers for diseases suffering the earthquake survivors. Recent studies revealed that individual human genome has so many single nucleotide variations (SNVs) and some of them might be unique to the individual (singleton). A part of the rare SNVs including singletons may be associated with the onset of a variety of diseases and the effect size might be large enough to be identified with statistical significance. As a beginning of establishment of the infrastructure for genome wide association studies of complex diseases specific for Japanese population, we are going to perform whole genome sequencing of 1,000 individuals living in Tohoku area. The analysis will enable to identify most of the rare variants (MAF > 0.5%) in the population. We will discuss the state of the art of whole genome sequencing in our laboratory and our strategy for the identification of genetic biomarkers for human diseases.

全東北人1000人参照ゲノム計画関連のインシリコ解析の状況とバイオインフォマティクス

長﨑　正朗
東北大学　東北メディカル・メガバンク機構
ゲノム解析部門　教授

東京大学大学院理学系研究科情報科学専攻博士課程修了　博士（理学）、東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターDNA情報解析分野　助手、東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターDNA情報解析分野　助教、東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターゲノム機能解析分野　准教授を経て現職に至る。

東北メディカル・メガバンク機構では、平成25年度に8000人規模のコホート調査をおこなうとともに、東北大学において平成25年度末には高深度の1000人の日本人全ゲノムリファレンスパネルのドラフト版の作成を目標とし、日々データ解析を進めている。
本講演では、全ゲノムシークエンスデータの解析のための計算機基盤の整備状況及び2013年11月時点でのインシリコ解析の状況を紹介する。さらに、日本人数百人の高深度シークエンスデータの解析で見えてきている変異や構造変異などの統計的な情報の一部について紹介することを予定している。
また、本機構では、長期健康調査を目的として3世代のコホート調査を平成25年9月に開始したが、この3世代の大規模シークエンス解析のミッションにあわせて演者らが開発を進めている高性能シークエンサのバイオインフォマティクスのアルゴリズム開発の状況や及びそのパフォーマンスなどについても時間が許す範囲で併せて紹介する。

新しい統合データベースとしてのバイオバンク開発

高井　貴子
東北大学　東北メディカル・メガバンク機構
医療情報ICT部門　准教授

お茶の水女子大学理学部化学科卒、東京大学理学系研究科生物化学専攻修士課程修了、理学博士。
国立医薬品食品衛生研究所厚生技官、東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター助手、東京大学情報理工学系研究科特任講師、東京医科歯科大学疾患生命科学研究部特任准教授を経て現職に至る。

統合データベースは、ゲノム情報を基軸とした生命科学知識の再構成が、データベース技術をもって可能であることを示した。特にヒトのゲノム情報を対象とした統合データベースは、医学や薬学の知識をも取り込み、より巨大な知識構造体へと発展した。バイオバンクは、さらに発展した統合データベースである、と私は考えている。バイオバンクの対象は同様にヒトであるが、そのヒトとは、現世に日々生きて生活し、泣き笑い、結婚して子をもうければ、離婚もし、時に病気になったり事故に遭うかもしれず、やがて死を迎える、生身の人間である。いや、正確に言えばもちろん、人間そのものではなく、血液等の生体試料の凍結保管と、生涯に亘る記録の集約である。
　バイオバンクには様々な種類があるが、東北メディカル・メガバンク機構が開発するバイオバンクは前向きコホート型であるので、まさに生身の人間の経時経年変化を、リアルタイムで収集することに特徴がある。いま、に対応できるだけでなく、未来、にも対応できる。未来に起こるかもしれない、疾患の発症というイベントに遭遇した時点で、凍結保管された細胞を取り出して、その時点の最先端の科学技術を用いてゲノム／オミックス解析が可能である。未来へ向かって、時間軸に展開した、統合データベースと言えるのではないか。その開発と技術的問題について、紹介したい。

東北大学　東北メディカル・メガバンク機構
〒980-8573　仙台市青葉区星陵町2-1
Tel.022-717-8078（代表）　URL. www.megabank.tohoku.ac.jp

東北メディカル・メガバンク機構
TOHOKU MEDICAL MEGABANK ORGANIZATION

企業広告

計算創薬 必須3アイテム

1 蛋白質 - リガンド・ドッキングソフト

GOLD Suite

蛋白質の構造データとドッキングさせたい
分子構造があればこれひとつで OK.

遺伝的アルゴリズムに基づくドッキングソフト GOLD．直感的に使えるユーザインターフェイス Hermes に加え，充実したスコアリング関数，アンサンブルドッキング，大量の計算結果を解析するツール GoldMine も付属しています．ファインドッキング，バーチャルスクリーニング共にご活用ください．

2 ケンブリッジ結晶構造データベース

CSD Systems

結晶構造を集めたデータベース．
分子間力の理解，
構造と物性の研究など活用法は無限大．

世界最大の分子性結晶の構造データベース．63 万件の実測値から得られる知見が，創薬研究をバックアップ．CCDC 独自開発の ConQuest により，3 次元検索を可能にし，厖大なデータから分子ジオメトリーや分子間相互作用の情報を迅速に抽出します．付属ソフト Mercury は，結晶構造の表示に加え，統計解析機能が充実しました．

3 蛋白質 - リガンド複合体検索ソフト

Relibase+

複合体の構造をより深く解析．
データストレージとシェアリングにも．

In-house サーバ使用で機密保持．検索ソフトと PDB のデータを提供し，お手元の構造を追加することも可能．CCDC ならではの 3 次元検索はもちろん，リガンドやキャビティーの類似性検索もできます．活性部位の重ね合わせ表示，水分子のネットワークの確認，検索結果の保存，かけ合わせなどユーティリティーも充実．

The Cambridge Structural Database
化学情報協会は英国 CCDC の国内総代理店です．

JAICI 化学情報協会
科学データ情報室
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
TEL：03-5978-3622　FAX：03-5978-3600
E-mail: crystal@jaici.or.jp

統合計算化学システム

MOE

Molecular Operating Environment

創薬・生命科学研究に最適な分子設計環境

- 分子モデリング・シミュレーション
  Molecular Modeling and Simulations
- ケムインフォマティクス
  Cheminformatics and High Throughput Discovery
- タンパク質モデリング
  Protein Modeling and Bioinformatics
- 立体構造に基づく分子設計
  Structure-Based Drug Design
- ファーマコフォア解析
  Pharmacophore Modeling
- 開発環境
  Development Environment

PSILO

タンパク質立体構造データベースシステム

3D相互作用検索
類似ポケット構造検索
リガンド結合部位の3D/2D表示
タンパク質の重ね合わせ

お問い合せはこちらまで

Ryoka Systems Inc.

Chemical Computing Group社 日本総代理店
株式会社 菱化システム
科学技術システム事業部
〒131-0045 東京都墨田区押上一丁目1番2号
東京スカイツリーイーストタワー 29階

TEL：03-6830-9724
FAX：03-5610-1161
URL: http://www.rsi.co.jp/ e-mail: support@rsi.co.jp

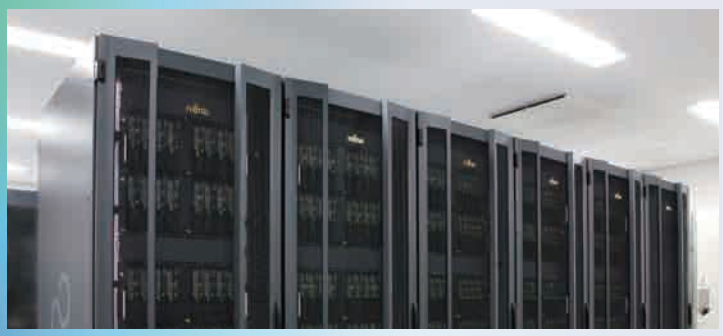
※記載の商品名等は各社の登録商標、または商標です。 ※本広告の仕様は予告無く変更する場合があります。

総演算性能
245TFLOPS増強
（汎用CPU51TFLOPS）
ストレージ2PB増設
フロントエンドサーバ
16台増設
（2014年1月稼働）

産業界向けの FOCUSスパコン稼働中

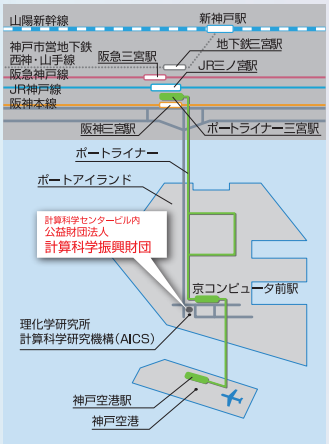
皆様の様々なニーズを FOCUSスパコンで試してみませんか？

- ●解析規模を拡大したい
- ●計算機需要ピーク時の外部計算資源として使いたい
- ●計算機選定の為のベンチマークテストをやってみたい
- ●ポスト処理の為に実装メモリの大きなマシンを使いたい
- ●複雑な事務処理をすることなく外部計算機資源を確保したい
- ●「京」に向けて作成された超並列計算対応のソフトウェアを使ってみたい
- ●トラブル対応の為、大至急で計算を行う必要があるのですぐに使いたい



FOCUS
公益財団法人
計算科学振興財団
Foundation for Computational Science

〒650-0047
兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-28
計算科学センタービル1階
TEL:078-599-5020 FAX:078-303-5611
URL:http://www.j-focus.or.jp/
E-mail:info@j-focus.or.jp

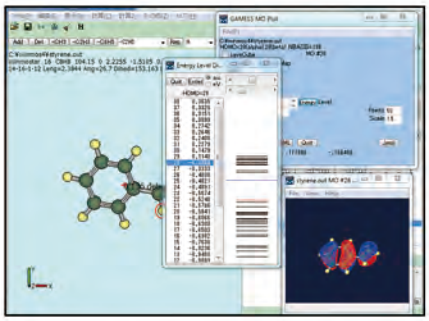


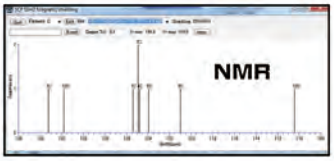
Winmostar
XA-CHEM-SUITE

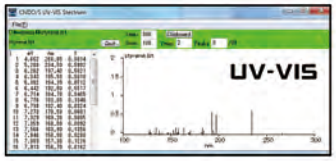
２０１３年8月１９日

材料や創薬のシミュレーションを安価に可能にする分子モデリングソフトウェアです

Winmostar™は、分子モデリングから量子化学計算・分子動力学計算、および計算結果の表示までをWindows上で軽快かつ直感的に実現するプリポストのソフトウェアです。
一般用（有償版、３ヶ月試用版あり）は学生・教育機関講師用**（無償版）**の全機能に加え、Linux (Unix)サーバ機やWindowsサーバ機へのリモートジョブ投入機能を有しています。
MOPAC6とCNDO/S(紫外・可視吸収ｽﾍﾟｸﾄﾙ計算用)を内蔵し、量子化学計算はGAMESS/Firefly, Gaussian, NWChemの、分子動力学計算はGromacsのインターフェイス機能を搭載しています。
対応フォーマット：p2n, pdb, cif, mol, mol2, sdf＋基本フォーマット







■動作OS
Windows XP/Vista/7/8（VMware fusion on Mac OSXも動作確認済）

■分子構築機能
操作方法は単純で、直感的に操作でき、初心者も短時間で習熟できます。原子単位の追加・変更・移動・削除に加えて、置換基の追加や、部分的に回転・移動・削除を行う機能に、クリーン（分子力学による簡易構造最適化）機能を用いることで、初心者でも簡単に分子構築を楽しむことができます。また、Z-Matrix編集機能も備えており、MOPACやGaussianのZ-Matrix座標の設定も容易です。

■計算機能
・内蔵：MOPAC6とCNDO/S (紫外・可視吸収スペクトル計算用)
・入力データ作成と起動：MOPAC, Gaussian, GAMESS/Firefly, NWChem, Gromacs
・分子表面積、体積、Ovality (卵形度)、アスペクト比算出、PIO解析

■出力可視化機能
・最適化構造、原子電荷、双極子モーメント、エネルギー準位、ステレオ表示、水素結合 、構造最適化・反応座標解析アニメーション 、紫外・可視吸収スペクトル、NMRスペクトル ・赤外吸収スペクトル、基準振動アニメーション・ベクトル ・分子軌道表示

■一般用ライセンス・価格 (税別)　※３ヶ月間の試用版あり

民間企業・官公庁シングルユーザライセンス (永久使用権＋１年保守)	￥94,000
民間企業・官公庁サイトライセンス（年間使用権＋保守）	￥400,000
アカデミック研究用シングルユーザライセンス (永久使用権＋１年保守)	￥47,000
アカデミック研究用サイトライセンス（年間使用権＋保守）	￥200,000

※シングルユーザライセンスの次年度目以降の保守更新はシングルユーザライセンスの半額です。

X-Ability クロスアビリティ
株式会社クロスアビリティ
〒113-0033 東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル301
http://winmostar.com/ E-Mail: question@winmostar.com

バイオサイエンスと医学の最先端総合誌

実験医学

おかげさまで1983年の創刊以来30周年!

定期購読のご案内

■ 月刊のみ(12冊/年) ⇒ 24,000円+税
■ 月刊+増刊(12冊+8冊/年) ⇒ 67,200円+税

※ 海外からのご購読は送料実費となります

月刊

毎月1日発行　B5判　定価(本体2,000円+税)

8月号 細胞の運命決定とリプログラミング
企画／鈴木淳史

9月号 Neurovascular Unit
神経-血管-グリアのユニットが脳と体を支配する
企画／荒井　健

10月号 フレミングが夢見た 染色体の核心
企画／平野達也

増刊

年8回発行　B5判　定価(本体5,400円+税)

Vol.31 No.7 生命分子を統合するRNA
ーその秘められた役割と制御機構
編集／塩見春彦，稲田利文，泊　幸秀，廣瀬哲郎

Vol.31 No.10 第三の生命鎖
糖鎖の機能と疾患
編集／門松健治，遠藤玉夫，岡　昌吾，北川裕之

Vol.31 No.12 腫瘍免疫学とがん免疫療法
編集／河上　裕

pick up!

2013年5月号(Vol.31 No.8)

生命システムを定量する!
―未知なる現象の謎を解け!

シグナル伝達，転写制御，細胞動態の時空間ダイナミクス

企画／小林徹也

生命現象の定量で何が見えるのか？　イメージング機器や次世代シークエンサーの進歩により大量に得られるデータから，細胞動態，シグナル伝達などの生命現象の謎に迫る!

最新刊

Vol.31 No.15

ゲノム医学・生命科学研究 総集編

ポストゲノムの10年は何をもたらしたか

編集／榊　佳之，菅野純夫，辻　省次，服部正平

ヒトゲノム完全解読から10年．ヒトゲノム計画に端を発する様々な研究と，それらを支える技術の発展。そこから広がる医学研究の途など，ゲノム研究の“今”をまとめた１冊．

実験医学別冊 最強のステップUPシリーズ

in vivoイメージング 実験プロトコール

原理と導入のポイントから２光子顕微鏡の応用まで

編／石井　優

これまでなかった＆これから必須な，先端実験を詳説する入門書が登場! 生きたマウスの中で免疫・がん・神経細胞の動きを可視化する，生体イメージングの原理・機器・手技の実際までがこの一冊に．

■ 定価(本体 6,200円+税)　■ B5判
■ 251頁　■ ISBN 978-4-7581-0185-1

見つける、量る、可視化する!
質量分析実験ガイド

ライフサイエンス・医学研究で役立つ
機器選択、サンプル調製、分析プロトコールのポイント

編／杉浦悠毅，末松　誠

前処理やイオン化，スペクトルの解釈など，何となくハードルを感じがちな質量分析実験の考え方・進め方をわかりやすく解説!本書をきっかけに，質量分析でさらなるステップUPをめざしましょう!

■ 定価(本体 5,700円+税)　■ B5判
■ 239頁　■ ISBN 978-4-7581-0186-8

発行 羊土社 YODOSHA

〒101-0052　東京都千代田区神田小川町2-5-1　TEL 03(5282)1211　FAX 03(5282)1212
E-mail：eigyo@yodosha.co.jp
URL：http://www.yodosha.co.jp/

ご注文は最寄りの書店，または小社営業部まで

時代はいま、新しい息吹を求めて、大きく動きはじめています。

今日を生きる人々がいつも元気でいられるように、

明日を生きる人々がいつもいきいきとしていられるように。

日立グループは、人に、社会に、次の時代に新しい風を吹き込み、

豊かな暮らしとよりよい社会の実現をめざします。

HITACHI
Inspire the Next

日立の樹オンライン　www.hitachinoki.net

株式会社 日立製作所　〒100-8280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号　電話（03）3258-1111（大代）

Joint Conference on Informatics in Biology,
Medicine and Pharmacology
October 28, 2013
Editor in chief: Tetsuo Nagano, Takayoshi Okabe,
Kenta Nakai, Masaaki Muramatsu
Production Director: Akihiko Konagaya
Production staff: Yoko Ozawa, Masumi Yukawa,
Naomi Komiyama, Yuko Tsukada,
Noriko Machida,
Maki Takahashi, Megumi Takahashi
Published by: Chem-Bio Informatics Society(CBI)
Annual Meeting 2013
4259 Nagatsuta-cho, Midori-ku, Yokohama,
Kanagawa 226-8502, Japan
Konagaya Lab., Tokyo Institute of Technology
TEL/FAX: +81-45-924-5654

生命医薬情報学連合大会
2013 年 10 月 28 日発行
編集責任：長野哲雄　岡部隆義　中井謙太
村松正明
制作責任：小長谷明彦
制作：小澤陽子　湯川真澄　小宮山直美
塚田優子　町田規子
高橋まき　高橋めぐみ
発行：CBI 学会 2013 年大会事務局
〒226-8502
神奈川県横浜市緑区長津田町 4259
東京工業大学大学院総合理工学研究科
小長谷研究室内
TEL/FAX：045-924-5654

E-mail: cbi2013@cbi-society.org
URL: http://www.biomedpharminfo.org/
Copyright©2012-2013 CBI society All rights reserved
ISBN:978-4-9903708-6-2

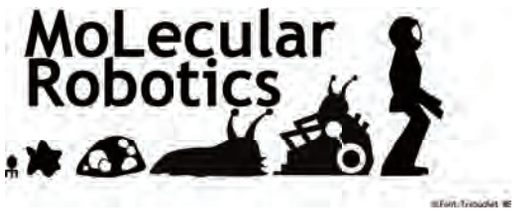
NABE3 International
株式会社 ナベ インターナショナル

Innovation in Motion
TSUBAKI

PerkinElmer®
For the Better

accelrys

WF
WORLD FUSION


MoLecular
Robotics

Patcore

Digital Biology®

MIZUHO

みずほ情報総研

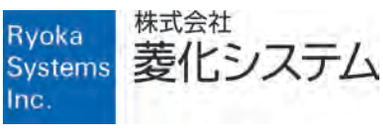
日本動物実験代替法学会
Japanese Society for Alternatives to Animal Experiments

Human Genome Center
the Institute of Medical Science
the University of Tokyo

THOMSON REUTERS™

CONFLEX
HIGH PERFORMANCE
Conformation Analysis

SCHRÖDINGER.


Ryoka
Systems
Inc.
株式会社
菱化システム

infocom
インフォコム株式会社

iPS
Academia Japan

Kyoto
Constella
Technologies

Affinity Science

神戸市
Kobe City
FOCUS

MKI
JBiC

life
technologies™

illumina®

株式会社DNAチップ研究所

DBCLS
Database Center for Life Science

NBDC
National Bioscience Database Center

東北メディカル・メガバンク機構
TOHOKU MEDICAL MEGABANK ORGANIZATION

NGSField

日立ソリューションズ

OIST

JAICI
化学情報協会

Genaris

キコーテック株式会社

MBL
株式会社 医学生物学研究所
MEDICAL & BIOLOGICAL LABORATORIES CO., LTD.

MOL-TALOU
モル・タロウ

X-Ability
クロスアビリティ

羊土社
YODOSHA

HITACHI
Inspire the Next

LABCYTE

The New Echo® 525 Liquid Handler

アッセイの微量化、コストの削減、データ精度の向上をお考えなら、ぜひ一度ご検討ください!!

100 nL ～ 10 µL のアッセイ構築に!!
25nL単位での分注コントロール

- チップ不要
- ユーザーキャリブレーション不要
- クロスコンタミネーション無し
- キャリーオーバー無し

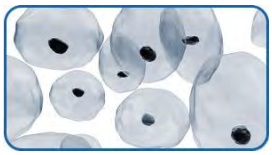
Echo® 525 liquid handler は最新世代の超音波分注装置です。音響エネルギーを用いて正確な量の液滴を形成し、分注を行います。チップを使わない完全非接触分注の技術が、これまでにない精度の分注をもたらします。

「25nL単位での分注量コントロール」・「どのウェルからどのウェルへも分注可能なフレキシブルなウェルアクセス」もあり、Echo 525 liquid handler は単純な分注パターンから複雑なプロトコルまで、あらゆるスケールでの分注に応用できます。また、先進的なDynamic Fluid Analysis™ テクノロジーにより、ユーザーは液ごとにキャリブレーションを行う必要は一切ありません。充実したソフトウェアツール群は、短時間で容易なアッセイ構築を可能にし、更にはオートメーションへの組み込みも容易にしました。

Echo® 525 liquid handler は広範囲のライフサイエンスアプリケーションに対応

Genomics

Proteomics



Biochemical Analysis

キコーテック株式会社

URL http://www.kiko-tech.co.jp/

本　　社　大阪府箕面市船場西三丁目10番3号
〒562-0036 TEL 072(730)6790 FAX 072(730)6795
東京支社　東京都世田谷区駒沢二丁目11番1号集花園ビル
〒154-0012 TEL 03(5787)3323 FAX 03(5787)3324
つくば営業所　茨城県つくば市竹園2丁目3-17 第一・ISSEIビル
〒305-0032 TEL 029(850)3771 FAX 029(856)3881
神奈川営業　神奈川県藤沢市藤が岡一丁目8番14号田中ビル1F
〒251-0004 TEL 0466(55)4110 FAX 0466(55)4120