

口頭発表「インシリコ創薬」分野

Selected Oral Presentations from 2nd Category (in silico drug discovery)

開催趣旨:

CBI学会年会では、招待講演以外の大半はポスター発表となっていますが、特に人だかりができていたようなポスターでは時間的・空間的制約から、なかなか発表者と話ができないという事態も起こっています。そこで口頭発表セッションで広く研究をご紹介頂ける機会を用意させて頂きました。大勢の方に発表内容をご理解頂き、また議論して頂くために、広めの部屋を用意しております。当分野にご興味のある方は是非ご参加ください。

モデレーター: 中村 光浩 NAKAMURA, Mitsuhiro

岐阜薬科大学 Gifu Pharmaceutical University

広川 貴次 HIROKAWA, Takatsugu

産業技術総合研究所 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

片倉 晋一 KATAKURA, Shinichi

第一三共 RD ノバーレ株式会社 Daiichi Sankyo RD Novare

高岡 雄司 TAKAOKA, Yuji

ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社 Dassault Systemes BIOVIA

中嶋 久士 NAKASHIMA, Hisashi

興和株式会社 Kowa

福澤 薫 FUKUZAWA, Kaori

星薬科大学 Hoshi University

沖山 佳生 OKIYAMA, Yoshio

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 CLST

■■■ 第1セッション(14:00-15:30) ■■■

1. P2-03 X線結晶構造解析とFMO計算によるFABP4阻害剤の相互作用解析
Interaction Analysis of FABP4 Inhibitors by X-ray Crystallography and Fragment
Molecular Orbital Analysis

田上 宇乃 TAGAMI, Uno

味の素 Ajinomoto

脂肪細胞やマクロファージに発現する脂肪酸結合タンパク質アイソフォーム 4(以後、FABP4)は糖尿病、動脈硬化症の疾患に関与することが示唆されており、その阻害剤はそれらの疾患治療に有効であると考えられている。より高活性なFABP4の阻害剤を作るためには、複合体構造を基にした相互作用情報が必要であった。X線結晶構造は得られていたが、より詳細な情報が必要であったため、FMO法を用いて、FABP4とその阻害剤の相互作用解析を試みた。古典力学の解析結果と共に論じる。

2. P2-09 分子動力学シミュレーションとX線小角散乱法を組み合わせた手法による、ビタミンD受容体リガンド結合ドメインのアポ体及びアンタゴニスト複合体の溶液構造探索
Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain in
solution studied by MD and SAXS hybrid approach

浴本 亨 EKIMOTO, Toru

横浜市立大学 Yokohama City University

核内受容体の活性調節にはヘリックス1-2付近の構造変化が鍵である事が知られているが、ビタミンD受容体リガンド結合ドメイン(VDR-LBD)の結晶構造では、アゴニスト/アンタゴニストに関わらずヘリックス1-2付近の構造に差がない。また、VDR-LBDのアポ体の結晶構造は報告されておらず、ヘリックス1-2形成に関わる知見が乏しい。我々は、X線小角散乱とMDを相補的に組み合わせた方法を用いて、アポ体及び、アンタゴニスト結合状態の溶液構造を見出した。

3. **P2-16 分子シミュレーションを用いた CYP1A2 に対する薬剤代謝部位予測**
Prediction of sites of metabolism of compounds for CYP1A2 by combined molecular simulations

齋藤 大明 SAITO, Hiroaki
理化学研究所 RIKEN

本研究では分子ドッキングと分子動力学シミュレーションを用いて薬剤代謝酵素（シトクロム P450:CYP1A2）で代謝される薬剤の代謝部位予測を行う。さらに薬剤内原子の反応性も考慮した新しいスコア関数も定義し、高精度の薬剤代謝部位予測を行う。

休憩(30分)

■■ 第 2 セッション(16:00-17:30) ■■

4. **16:00-16:10**

P2-04 Exploring Structural Diversity and Ligand Binding Property Consensus from Protein Structure Database

OKADA, Akitoshi Ryoka Systems Inc.

5. **16:10-16:20**

P2-06 Molecular dynamic approach to identify significant PTP1B inhibitors to combat diabetes

BIBI, Shabana Maebashi Institute of Technology

6. **16:20-16:30**

P2-08 Predicting inhibitory and activatory effects of drug candidate compounds from chemically-induced transcriptome data by a multitask learning with gene perturbation similarity

SAWADA, Ryusuke Kyushu University

7. **16:30-16:40**

P2-10 Efficient Similarity Search Using Multiple Reference Molecules on PG-Strom architecture

KAIGAI, Kohei NEC Business Creation Division

8. **16:40-16:50**

P2-12 Application of deep learning for large scale data with standard performance workstation(s)

KITAJIMA, Tetsuro Research Institute of Systems Planning Inc.

9. **16:50-17:00**

P2-14 Human insight in drug discovery: docking pose selection in protein-ligand docking and hit-compounds selection in structure-based virtual screening

YAMAMOTO, Kazuki The University of Tokyo

10. **17:00-17:10**

P2-21 GPCR/Membrane Model Builder for Molecular Dynamics Simulation

WADA Mitsuhiro Next Generation Natural Products Chemistry

11. **17:10-17:20**

P2-25 Discovery of Novel LPA-1 Antagonists – Computational Analysis for Molecular Design –

EGASHIRA, Hiromu Ono Pharmaceutical Co., Ltd.

12. **17:20-17:30**

P2-28 An Application of Deep Learning for Classifying Chemical Structures

WAKABAYASHI, Yoshinori BY-HEX LLP