

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第2巻第3号

2014年7月31日発行

CBI 学会誌

第2卷 第3号

2014年7月31日発行

CBI 学会

目次

(1) 2014 年大会フォーカストセッションのご紹介	1
(2) 委員会報告	9
(3) 講演会報告・予告	12

2014 年 10 月 28 日 (火) ~ 30 日 (木)、CBI 学会 2014 年大会が開催されます。
本号では、フォーカストセッションに焦点をあて、ご紹介させていただきます。
多くのご参加をお待ちしております。

Chem-Bio Informatics Society(CBI) Annual Meeting 2014

フォーカストセッションのご紹介

Schedule

10 月 28 日 (火)

- ▶ 「In vitro 実験系におけるヒト iPS 細胞由来神経細胞間の「シナプス形成不全」解決にむけて - Human neuronal circuitry on dish は実現できるのか」
14:00 - 16:00 4 階 研修室

10 月 29 日 (水)

- ▶ 「計算毒性学研究会」
14:00 - 15:30 4 階 研修室
- ▶ 「第 2 回オミックス解析における実務者意見交換会」
14:00 - 15:30 4 階 401 会議室
- ▶ 「第一原理計算とメタボロミクス：予測と実証」
14:00 - 15:30 4 階 406 会議室
- ▶ 「in silico 不整脈予測における CiPA の考え方、および日本の取り組み」
14:00 - 15:30 4 階 407 会議室
- ▶ 「ゲノム電子カルテ」
16:00 - 17:30 4 階 401 会議室

10 月 30 日 (木)

- ▶ 「計算化学とデータベースの融合」
14:00 - 15:30 4 階 研修室
- ▶ 「第 8 回 FMO 研究会 - ナノバイオ分子計算とデザイン」
15:30 - 17:00 4 階 研修室
- ▶ 「ヒト iPS 細胞誘導分化細胞を用いた安全性評価における課題に関する意見・情報交換会」
13:30 - 17:00 4 階 401 会議室

- ▶ 共催セッション 新学術領域「分子ロボティクス」
29 日 14:00 - 17:30、30 日 14:00 - 17:30 5 階 小ホール



The First Day - 10月28日(火)

In vitro 実験系におけるヒト iPS 細胞由来神経細胞間の「シナプス形成不全」 解決にむけて - Human neuronal circuitry on dish は実現できるのか

**Attempts to solve the 'synapse hypoplasia' of hiPSC-neurons by industry,
government, and academia.— Will human neuronal circuitry on dish be realized?**

■開催時間：14:00 - 16:00

■場所：4階 研修室

■開催趣旨：ヒト iPS 細胞 (hiPSC) 由来神経細胞は実験動物からの神経初代培養系に比べ、ヒト予測性に優れた新しい *in vitro* 実験系を実現すると期待されているが、これまでのところ hiPSC 由来神経細胞同士の安定したシナプス形成は達成されていない。*in vitro* 実験系における「シナプス形成不全」について産・官・学から現状や解釈、取り組みをご紹介いただき、議論する場としたい。

■モデレーター：佐藤 薫 Kaoru Sato (国立医薬品食品衛生研究所 NIHS, Japan)

■プログラム

(1) hiPSC 由来神経細胞に期待すること—医薬品開発における実用のために

佐藤 薫 Kaoru Sato (国立医薬品食品衛生研究所 NIHS, Japan)

医薬品開発における実用においてヒト iPS ニューロンに期待する点を概説する。過去 5 年間にわたり、国衛研にはアカデミアやメーカーから種々のヒト iPS ニューロンが供与されている。これらの神経細胞特性解析により、最近ある傾向が見えてきた。この傾向をふまえ、今後の研究方向性について考察する。

(2) 多電極アレイシステムを用いたヒト神経細胞ネットワーク機能解析

福島 一幸 Kazuyuki Fukushima (イーザイ株式会社 Eisai Co., Ltd.)

創薬におけるヒト神経細胞を活用した生理学的な化合物評価系、すなわち、多電極アレイシステムによる神経機能評価系の構築について紹介する。これまでの条件検討により、細胞外電位の同期が見られるようになり、神経ネットワーク機能を検出できる可能性を見出した。現状と今後の課題解決について議論したい。

(3) ヒト iPS 細胞由来神経細胞の成熟過程についての考察

白尾 智明 Tomoaki Shirao (群馬大学大学院医学系研究科 Gunma University Graduate School of Medicine)

ヒトの中枢神経機能をミミックするための培養細胞システムとして、ヒト iPS 細胞由来神経細胞を用いたシステムが有力である。しかしながら、ヒト iPS 細胞由来神経細胞間に可塑的シナプスを形成することはまだ実現できていない。ヒト iPS 細胞由来神経細胞の成熟過程をマウス由来初代培養神経細胞と比較すると、遺伝子発現とタンパク質の局在化との間で、成熟に伴い不釣り合いが出現することが解る。この問題点を踏まえ、今後の研究の方向性について考察する。

(4) iPS 細胞を用いたニューロパソロジーの創成

井上 治久 Haruhisa Inoue (京都大学 iPS 細胞研究所 Center for iPS Cell Research and Application (CiRA))

私たちは、新たな疾患リソース、iPS 細胞を用いることにより、新たな疾患モデル構築をめざしている。本講演では、私達の研究をご紹介します、議論を深めさせていただく。

The Second Day - 10月29日(水)

計算毒性学

Computational Toxicology

■開催時間：14:00 - 15:30

■場所：4階 研修室

■開催趣旨：CBI学会2014年大会テーマにあるように、今後は様々な研究分野で *in silico* の適用技術が大きなパラダイムとなる。特に化合物毒性研究においては、「計算毒性学 (Computational Toxicology)」が今後の化合物毒性に関する様々な分野での重要なキー技術となることは間違いない。なお、本セッションは本年の5月にCBI学会に設立された「計算毒性学」研究会が主催する最初の研究会活動となる。毒性の無い化合物をデザインし、生産、販売することは、化合物を扱う総ての企業活動に影響する極めて重要な課題である。副作用や毒性の無い薬、安全な機能性化合物、環境に負荷をかけない化合物等の効率的なデザインが求められる。さらにEUでは、動物愛護の観点より、化粧品分野では化合物の政府登録に実験動物を用いたデータを使うことは禁止された。今後は *in vitro* による実験のみが実施可能であり、この中で *in silico* の果たす役割が急速に増大している。

「計算毒性学」は毒性学、特に毒性評価に関する切り札的な技術として急速に注目を集めている。既に欧米では「計算毒性学」に関する研究分野が急速に成長し、様々な研究会、企業や国が関与するプロジェクト等が立ち上がり、多くの実績を上げつつある。残念ながら、日本では西欧と異なり計算毒性学の活動実績が殆ど無い。この観点でも、本大会に「計算毒性学」のフォーカスセッションが設けられたことは意義深いものと考えられる。

■モデレーター：湯田 浩太郎 (株式会社インシリコデータ)

■プログラム：

本セッションでは以下の4演題の講演を予定している。

- (1) Deeper insight on physicochemical determinants of hERG inhibitor specificity
- (2) ACD/Percepta Structure Design Engine: Virtual enumeration and screening of physchem properties for 10^{16} compounds in real time
- (3) 「計算毒性学 (Computational Toxicology)」の基本と「計算毒性学」研究会の紹介
- (4) 演題未定

最初の2講演はカナダのACD社が開発展開している Percepta を用いた ADMET 予測と仮想化合物創出に関する講演である。欧米での計算毒性学に基づいた最新のシステムの適用事例や、システムの内容に関する情報を入手できると考える。続く3番目の講演はインシリコデータの湯田が行う。「計算毒性学」の重要性は急速に高まっている。講演では「計算毒性学」の基本や、計算毒性学を構成する要素技術等を俯瞰する。

また、CBI学会に設立された「計算毒性学」研究会の紹介を行う。最後の講演は横浜薬科大学の高橋孝志先生による「コンビナトリアルケミストリー」の化合物毒性スクリーニングへの展開に関する講演を予定している。

本セッションは「計算毒性学」にフォーカスを当てているが、「計算毒性学」は様々な要素技術より構成され、すそ野の極めて大きな複合研究分野である。多くの研究者が分野を超えて、日本の「計算毒性学」を支えて行くべく集まっていたら幸いである。



第 2 回 オミックス解析における実務者意見交換会

The Second Working Group Meeting on Omics-based Analysis

■開催時間：14：00 - 15：30

■場所：4 階 401 会議室

■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、次世代シーケンシングの普及と相まって、分子生物学のみならず医学・薬学・農学などの分野に発展をもたらしている。近年では、オミックス情報に対して環境因子や疾患に関する情報などの付帯データを組み合わせ、ビッグデータによる知識発見のための試みも世界中で進められている。

さて、昨年度の第 1 回ではアカデミアの第一線でオミックス情報の解析に携わる研究者をお迎えしたが、本年度は企業の視点からオミックス解析への期待と現実、個人情報保護や生命倫理に関わる諸問題、ブレイクスルーのためのアイデア、人材とキャリアパス、そして将来的なビジネス展望などについて広くご討論いただき、会場の方々とブレイ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 (順天堂大学大学院 医学研究科 ゲノム・再生医療センター Center for Genomic and Regenerative Medicine, Juntendo 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)

■プログラム：

(1) Phenome = Genome + Envirome - 個人全遺伝子解析時代に向けて -

丸山 智久 Tomohisa Maruyama (ENVIROME 株式会社 Envirome, Inc.,

東京医科歯科大学大学院 医歯学総合研究科 生命情報学 Tokyo Medical and Dental University)

GWAS に続き、EWAS という考え方も提唱され、本年 7 月には NIH's National Center for Advancing Translational Science が遺伝情報を創薬につなげるなどオミックスデータ解析結果がダイレクトに社会に役立つ兆しが見え始めてきた。匿名化された個人の全遺伝子と環境子情報、表現子(表現型)情報を比較し、そこから知的財産を生み出す試みがますます活発化していくとみられる。

また、健康関係デバイスの進展も目まぐるしくそれらのデータを繋ぐバイオインフォマティクスの必要性もますます増してくる。

今回の発表では、次世代のオミックス情報活用のヴィジョンを踏まえ、グローバルかつローカルに現在のバイオインフォマティクスに足りていない視点、創薬等に必要データデザイン、バイオインフォマティクスとして求められる全体における役割などの点を考察する。

(2) パーソナルゲノムサービスを始めて見えてきたこと

高橋 祥子 Shoko Takahashi (株式会社ジーンクエスト Genequest, Inc.)

ゲノムを読むことが当たり前になった時代には、適切な倫理観、コミュニケーション、研究のサイクルなどが求められている。今後ゲノムを読む技術が浸透していくとどのような展開が待ち受けており、どのような問題に直面するのか、研究者としては何が出来るのか。既に動き出しているパーソナルゲノム時代の現状と未来について、パーソナルゲノムサービス事業を立ち上げた経緯を交えながら、事業を通して感じること、見えてきたことについてお話いたします。

(3) 産業界で求められるバイオインフォマティクス

緒方 法親 Norichika Ogata (株式会社日本バイオデータ Nihon BioData Corporation,

次世代バイオ医薬品製造技術研究組合 事務局顧問(ゲノム技術) Manufacturing Technology Association of Biologics)

弊社ではデータ解析サービスを提供しております。本セッションでは架空の案件を具体的に想定し、あまり喜んでいただけないばかりでなくバイオインフォマティクス自体の価値を貶める解析モデルと、喜んでいただければ、かつ研究者、技術者の自己実現に繋がる解析モデルを提示しながら、我々の考えるバイオインフォマティクスのあるべき姿について紹介します。

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

■開催時間：14：00 - 15：30

■場所：4 階 406 会議室

■開催趣旨：計測技術革新によって、細胞内の低分子化合物を一斉分析する代謝物プロファイリング（メタボロミクス）が、ここ 10 年で大きく発展してきている。幅広い範囲の代謝物測定を効率化してデータ生成速度が上がり、疾患バイオマーカー探索、遺伝子機能の解明や組換え植物種の化学的多様性評価に用いられている。一方、量子化学計算に基づいて生体分子の物性や機能を予測する研究の進展も著しい。

本セッションでは、第一に代謝物プロファイリング技術および量子化学計算の現状を整理する。次いで、我々が進めている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を紹介する。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を議論したい。最後に、多くの方々のご参加を歓迎いたします。

■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)

■演者 (交渉中)

in silico 不整脈予測における CiPA の考え方、および日本の取り組み

Moving toward *in silico* arrhythmic assessment : The paradigm of CiPA and efforts in Japan

■開催時間：14：00 - 15：30

■場所：4 階 407 会議室

■開催趣旨：昨年 7 月の CSRC-HESI-FDA 会議において薬物の心臓安全性評価に関わる ICH E14 廃止と S7B の改訂に関する提案が発表されたことを受けて、評価のエンドポイントを QT 延長作用から催不整脈作用に変更するとともに、新たな非臨床試験法として CiPA (Comprehensive *in vitro* Proarrhythmia Assay) の議論が始まった。

現在、ヒト iPS/ES 細胞由来心筋細胞を用いた *in vitro* 評価と、複数のヒトイオンチャネルへの反応性から不整脈リスクを予測する *in silico* 評価を組み合わせる提案がなされ、新たな方法論構築等に関する検討・議論が活発に行われている。CiPA *in silico* WG の考え方と日本発の提案に向けた取り組みという観点で、現状と課題を今一度整理し、共有化しておく必要があると判断し、本フォーカスセッションを企画する。

■モデレーター：黒川 洵子 Junko Kurokawa (東京医科歯科大学 Tokyo Medical and Dental University)

■プログラム：

(1) CiPA が提案しようとする薬物催不整脈リスク予測のパラダイム

古谷 和春 Kazuharu Furutani (大阪大学大学院医学系研究科 Osaka University Graduate School of Medicine)

創薬候補物質の催不整脈リスク予測に関して、CiPA (Comprehensive *in vitro* Proarrhythmia Assay) に関する共同議論の場が開かれている。この会議は、hERG channel に留まらない multi ion channel assay を創薬早期に非臨床試験として実施し、得られたデータを *in silico* において評価することによって、現在臨床試験で実施されている Thorough QT テストに変わる、催不整脈作用をエンドポイントとする新しいリスク評価法の提案を目指している。CiPA が提案しようとする新しい心臓安全性薬理のパラダイムをご紹介します、現在の課題について議論したい。

(2) 心筋細胞活動電位モデルと安全性評価

朝倉 圭一 Keiichi Asakura (日本新薬株式会社 Nippon Shinyaku Co., LTD.)

創薬における *in silico* 活用は、これまでも化合物の構造活性相関などに活用されている。最近 CiPA に
おける提言を受けてヒト心筋細胞モデルを用いた *in silico* 評価が注目を集めているが、創薬現場におけ
る活用についてはまだまだ発展途上にある。今回は創薬早期におけるヒト心筋細胞活動電位モデルの活
用について紹介し、心毒性安全性評価への *in silico* 評価の可能性について議論したい。

(3) バーチャル iPS 細胞由来心筋細胞への飽くなき挑戦

芦原 貴司 Takashi Ashihara (滋賀医科大学循環器内科・不整脈センター Shiga University of
Medical Science)

ヒト iPS 細胞由来心筋細胞の安全性薬理評価や遺伝性不整脈治療への応用が期待されているが、その
電気生理学的特性がオリジナルの心筋細胞と同じとは限らない。コンピュータモデル (*in silico*) による
バーチャル iPS 細胞由来心筋細胞 (viPSC-CM) がもたらす可能性と、今後の研究の方向性について概
説する。

(4) UT-Heart を用いた薬剤の心毒性評価

岡田 純一 Jun-ichi Okada (東京大学大学院新領域創成科学研究科 The University of Tokyo
Graduate School of Frontier Sciences)

UT-Heart は心筋細胞の電氣的興奮から心収縮までを統合し心電図も再現できる世界で唯一のマルチス
ケール・マルチフィジックス心臓シミュレータであり、薬剤の心毒性評価に関する共同研究をエーザイ・
東京医科歯科大と進めている。今回はその研究の現状を報告する事により、*in silico* 心毒性評価の近い
将来における実現可能性を示すと共に、その際実験において求めるべきデータが何であるかを議論したい。

ゲノム電子カルテ

- 開催時間: 16:00 - 17:30
- 場所: 4 階 401 会議室
- モデレーター: 荻島 創一 (東北大学 東北メディカル・メガバンク機構)



共催セッション 新学術領域「分子ロボティクス」

- 開催時間: 29 日 14:00 - 17:30、30 日 14:00 - 17:30
- 場所: 5 階 小ホール
- モデレーター: 小長谷 明彦 (東京工業大学)

The Third Day - 10 月 30 日 (木)

計算化学とデータベースの融合

■開催時間：14：00 - 15：30

■場所：4 階 研修室

■開催趣旨：近年、生命科学に関連する多様なデータベースが作成・公開され、それらを利用することが重要な研究手段の一つとなっている。本セッションでは、既存データベースを利用した応用研究および計算化学に関連したデータベースの作成を行っている先生方に講演していただく予定である。

■モデレーター：石川 岳志（長崎大学 医歯薬学総合研究科）

■プログラム：

- (1) 量子化学計算による相互作用エネルギーの空間分布と PDB 中リガンド原子の空間分布の解析
渡邊 博文（理化学研究所）

従来ドッキングに用いられてきた古典力場に基づくスコア関数は、分極や電荷移動の効果が取り込まれておらず、その精度に問題があった。本研究では、高精度の量子化学計算を用いてプローブ分子とアミノ酸との相互作用エネルギーの空間分布を計算し、古典力場、および PDB 中のアミノ酸残基の周辺のリガンド原子の実際の分布と比較した。

- (2) 量子化学文献データベース QCLDB II：その学術的意義と今後に向けて
森 寛敏（お茶の水女子大学）

量子化学文献データベース（QCLDB）は、1975 年より現在まで、国内の量子化学研究会のメンバーが構築してきた量子化学の文献データベースである。情報計算生物化学分野・創薬の分野で、量子化学の手法は研究開発を後方支援する手法として重用される。本講演では QCLDB の特徴と、今後の発展に向けた課題について紹介・議論したい。

- (3) 電子状態計算を基盤とする分子探索システムの開発
杉本 学（熊本大学）

分子の電子状態はその反応性と物性を決定する重要因子である。本講演では、電子状態計算の結果を集積したデータベースを作成するとともに、電子状態的特徴に基づく分子探索手法を開発し、薬理活性解析に用いた結果を紹介する。

- (4) 理論化学計算による第一原理からの小分子データベースの構築
中田 真秀（理化学研究所）

第一原理計算を使った小分子のデータベースを作成している (<http://pubchemqc.riken.jp/>)。PubChem から分子の情報を取得し、構造最適化計算および励起状態計算を行ったものを現在 15 万分子程度公開している。



第 8 回 FMO 研究会「ナノバイオ分子計算とデザイン」

■開催時間:15:30 - 17:00

■場所:4 階 研修室

■開催趣旨:第 8 回 FMO 研究会は、大会のフォーカストセッションとして行います。今回は、FMO とその関連方法の開発者の皆様に、最新の機能と応用について、存分に語っていただきます。

■モデレーター:古明地 勇人(産業技術総合研究所 バイオメディカル研究部門)

■プログラム:現時点で、次の先生方に講演していただく予定です。

(1)「第一原理計算に基づくタンパク質機能デザイン」

重田 育照(筑波大学教授)

FMO の結果だけでなく、酵素反応解析、MD シミュレーションによるタンパク質折りたたみ、基質結合、誘導適合などについて講演する予定である。

(2)「FMO 法を用いた最近の研究 -PAICS の開発と生命科学への応用」

石川 岳志(長崎大学准教授)

これまで、FMO 計算プログラムの一つとして PAICS の開発を続けると共に、医学・薬学といった生命科学分野での応用研究を進めてきた。今回、最近の研究のうち、RI 法を用いた計算の高速化、QM/MM 法への拡張、プリオン病の薬剤開発への応用などに関して講演する。

(3)「ABINIT-MP の京での性能について」

望月 祐志(立教大学教授)

ABINIT-MP プログラムの最近の開発状況、特に京コンピュータへの移植と性能評価について紹介する。

(他一名交渉中)

ヒト iPS 細胞誘導分化細胞を用いた安全性評価に

おける課題に関する意見・情報交換会

Opinion- and information-exchanging public meeting for issues in the drug safety evaluation using human iPSC-derived cells

■開催時間:13:30 - 15:00, 15:30 - 17:00

■場所:4 階 401 会議室

■開催趣旨:近年、ヒト iPS 細胞誘導分化細胞を用いた薬剤候補の安全性評価に関心が向けられ、研究が盛んになってきている。安全性に関しては、ノウハウを一般化することにもメリットがあり、日本安全性薬理研究会、製薬協ヒト iPS 細胞応用安全性評価コンソーシアム、国衛研ヒト iPS 心筋検証試験などで情報が共有され活発に議論が進められている。本フォーカストセッションでは、各団体の垣根を取り払い、個別の研究者が抱える問題解決に向け議論をすることにある。上記団体以外の iPS 細胞誘導細胞を用いた安全性研究に関わる研究者、機器開発や試薬開発に関わる研究者や関係者のご参加も歓迎する。

■モデレーター:宮本 憲優 Norimasa Miyamoto (イーザイ Eisai)

長田 智治 Tomoharu Osada (LSI メディエンス LSI Medience)

■課題募集のお知らせ:

上記目的での課題を、大きなところから小さなところまで募集します。こんなこと聞いても大丈夫かなど心配なさらず投げてください。その疑問にお答えすべく人選して回答を導くことを試みます。その場で回答が得られなくても、問題提起ということでもかまいません。また、各団体の議論されている内容の続きをこの場で展開していただいてもかまいません。プレゼンテーションも歓迎します。皆様自身が、このフォーカストセッションを有効にご利用いただけるようお手伝いをさせていただきます。

*課題連絡先:宮本 憲優(イーザイ株式会社) n-miyamoto@hcc.eisai.co.jp

委員会報告

【創薬研究会運営委員会】

第 11 回創薬研究会運営委員会

日時：2014 年 5 月 16 日 (金) 10:00 - 12:30

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

出席者 (敬称略)：石川 誠 (日産化学)、岡部 隆義 (東京大学)、小田 晃司 (大正製薬)、片倉 晋一 (第一三共ノバール)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、佐藤 貴哉 (カモソフトウェアジャパン)、嶋根 みゆき (中外製薬)、高岡 雄司 (アクセルリス)、高土居 雅法 (杏林製薬)、田上 宇乃 (味の素)、多田 幸雄 (東京大学)、中嶋 久士 (興和)、新美 達也 (アステラス製薬)、福澤 薫 (みずほ情報総研)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、塚田 優子 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：江口 晃史 (CTCLS)、大元 和之 (小野薬品)、狩野 敦 (菱化システム)、上村 みどり (帝人ファーマ)、河合 隆利 (エーザイ)、砂田 真志 (田辺三菱製薬)、田中 博 (東京医科歯科大)、谷村 隆次 (東レ)、服部 一成 (塩野義製薬)、松本 俊二 (富士通)、水間 俊 (松山大学)、望月 祐志 (立教大学)

議題：(1) 新規加入者ご紹介 (株)カモソフトウェアジャパン 佐藤貴哉様
(2) 2014 年大会のお知らせ-小長谷理事
(3) CBI 学会夏の合宿 2014 in 道後のお知らせ-小長谷理事
(4) 各講演会の企画進捗状況報告
(5) 今来期グループ分けの確認
(6) 報告事項
(7) 今後の講演会企画についてグループ毎に討議



【関西部会】

第 7 回関西部会運営委員会

日時：2014 年 4 月 11 日 (金) 10:00 - 12:00

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

出席者 (敬称略)：小長谷 明彦 (東工大)、鶴田 宏樹 (神戸大)、志水 隆一 (都市活力研究所)、水口 賢司 (医薬基盤研究所)、森 浩禎 (奈良先端大)、森 一郎 (神戸大)、山崎 一人 (大日本住友製薬)、早乙女 周子 (京都大)、塩田 武司 (塩野義製薬)、坂田 恒昭 (関西副部会長、塩野義製薬)、田中 成典 (関西部会長、神戸大)、牛尾 (書記、神戸大)

欠席者 (敬称略)：正城 敏博 (大阪大)、奥野 恭史 (京都大)、木下 誉富 (大阪府立大)、田口 隆久 (産業技術総合研究所)

議題：(1) 12 月 2 日 (火) 次回 CBI 学会関西部会研究講演会 (グランフロント大阪イノベーションハブ) について
(2) 次々回 CBI 学会関西部会講演会の計画
(3) 今後の方針、企画等について

【執行部会】

第 14 回執行部会

日時：2014 年 4 月 16 日 (水) 18:10 - 21:00

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

出席者 (敬称略)：田中 博 (東京医科歯科大)、岡部 隆義 (東京大学)、河合 隆利 (エーザイ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、
高岡 雄司 (アクセルリス)、多田 幸雄 (東京大学)、望月 祐志 (立教大学)、水間 俊 (松山大学) (スカイプ)、小澤 陽子 (事務局)
欠席者 (敬称略)：片倉 晋一 (第一三共ノバーレ)、本間 光貴 (理化学研究所)、田中 成典 (神戸大学)

資料：(1) CBI2014 年大会 予算進捗報告
(2) 生命医薬情報学連合大会 2014 CBI 担当セッションについて
(3) 評議員リスト・個人会員登録状況
(4) CBIJ 編集委員リスト

議題：(1) 大会予算進捗状況報告 (河合先生)
(2) 連合大会進捗状況報告 (田中先生)
(3) 多田先生の研究会委員会委員長の就任依頼について
(4) 評議員の最新名簿について
(5) 顧問から意見を伺う会の新設について
(6) その他



第 15 回執行部会

日時：2014 年 5 月 14 日 (水) 18:15 - 19:45

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

出席者 (敬称略)：田中 博 (東京医科歯科大)、石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援 (申請中))、岡部 隆義
(東京大学)、片倉 晋一 (第一三共ノバーレ)、河合 隆利 (エーザイ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、高岡 雄司 (アク
セルリス)、多田 幸雄 (東京大学)、水間 俊 (松山大学) (スカイプ)、小澤 陽子 (事務局)
欠席者 (敬称略)：田中 成典 (神戸大学)、本間 光貴 (理化学研究所)、望月 祐志 (立教大学)

資料：(1) CBI2014 年大会 予算進捗状況
(2) 生命医薬情報学連合大会 2014 CBI 担当セッションについて
(3) 「CBI 学会夏の合宿 2014 in 道後 / 松山」プログラム
(4) 2015 大会概要

議題：(1) CBI2014 年大会予算進捗状況報告ほか (河合先生)
(2) 連合大会進捗状況報告 (田中先生)
(3) 「CBI 学会夏の合宿 2014 in 道後 / 松山」について (水間先生)
(4) 2015 年大会テーマ、大会長、実行委員、プログラム委員について (片倉先生)
(5) その他



第 16 回執行部会

日時：2014 年 6 月 13 日 (金) 18:00 - 20:00

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

出席者(敬称略)：田中 博(東京医科歯科大)、片倉 晋一(第一三共ノバーレ)、河合 隆利(エーザイ)、小長谷 明彦(東京工業大学)、
多田 幸雄 (東京大学)、望月 祐志 (立教大学)、水間 俊 (松山大学) (スカイプ)、小澤 陽子 (事務局)

欠席者(敬称略)：石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援(申請中))、岡部 隆義(東京大学)、高岡 雄司(アクセルリス)、
田中 成典 (神戸大学)、本間 光貴 (理化学研究所)

資料：(1) CBI2014 年大会 プログラム

(2) フォーカストセッション概要

(3) 出展一覧

(4) 生命医薬情報学連合大会 2014 CBI 担当セッションについて

(5) CBI2015 年大会プログラム委員案

(6) 2014 年研究講演会参加者人数及び収支

(7) CBIJ 投稿数を増やすための対策について

議題：(1) 大会進捗状況報告

(2) 連合大会進捗状況報告

(3) 2015 年大会に向けて

(4) 月例研究会進捗状況報告

(5) CBI Journal の今後について



【特定非営利活動法人情報計算法学生物学会理事会】

第 1 回特定非営利活動法人情報計算法学生物学会理事会

日時：2012 年 4 月 16 日 (水) 18:00 - 18:10

場所：東京大学山上会館大会議室 (東京都文京区本郷 7 - 3 - 1)

出席者(敬称略)：小長谷 明彦(東京工業大学)、多田 幸雄(東京大学)、水間 俊(松山大学)、岡部 隆義(東京大学)、河合 隆利(エーザイ)、田中 博 (東京医科歯科大)、片倉 晋一 (第一三共ノバーレ)、本間 光貴 (理化学研究所)

(理事総数 9 名 委任状を含む出席者数 8 名)

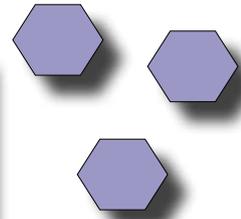
議長：小長谷 明彦

議事録署名人：多田 幸雄 (東京大学)、河合 隆利 (エーザイ)

審議事項：議案 1 石川 智久氏の理事就任の件



研究講演会 記録



第 349 回 CBI 学会研究講演会

「日本版 NIH の現状とオープンイノベーションの成果」

開催報告：

産学連携の重要性がアカデミア・インダストリー双方ともに認識されている昨今において、国家的に、そして地域主導で様々な取り組みの下で、産学での優れた研究成果が輩出され始めている。

今後の研究開発の企画・実行、及び大きな展開を図る為には、これらの動向と成果を理解することが重要であると言える。そこで本講演では日本版 NIH 構想を始めライフサイエンス系での国家的取り組みが注目されていることから、大阪大学大学院医学研究科 森下 竜一先生には、その取り組みについての現状をご講演いただいた。

また産学連携の注目すべき具体的成果として、神戸大学大学院医学研究科 片岡徹先生には抗癌剤、元中外製薬株式会社大杉義征先生にはアクテムラの経緯をご講演頂いた。



日時：2014 年 4 月 11 日（金）13:15 - 17:00

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル 北館タワー C 8 階 カンファレンスルーム C01+C02
(大阪市北区大深町 3-1)

世話人：坂田 恒昭（大阪大学）、鶴田 宏樹（神戸大学）

共催：公益財団法人都市活力研究所

協賛：NPO 法人バイオグリッドセンター関西、NPO 法人近畿バイオインダストリー振興会議

プログラム：

- (1) 13:15 - 13:20 開会の挨拶
- (2) 13:20 - 14:20 「日本版 NIH など今後の医療政策について」
森下 竜一（内閣府規制改革会議、内閣官房健康医療戦略室、
大阪府市統合本部医療戦略会議、大阪大学大学院医学研究科）



森下竜一先生



片岡徹先生

- (3) 14:40 - 15:40 「アカデミア発、*ras* がん遺伝子産物を分子標的とした抗がん剤の開発」
片岡 徹 (神戸大学大学院医学研究科)
- (4) 15:40 - 16:40 「新薬アクテムラの誕生—国産初の抗体医薬品」
大杉 義征 (一橋大学イノベーション研究センター)
- (5) 16:40 - 17:00 まとめと総合討論



大杉義征先生



懇親会風景

第 350 回 CBI 学会研究講演会

「ICH M7 ガイドライン (Step2) : ハザード評価の要件 - (Q) SAR 予測法への対応 -」

開催報告 :

原薬及び製剤に低レベルで存在する (又は存在することが合理的に予測される) 変異原性不純物の推奨される評価と管理に関するガイドライン (案) が早ければ 6 月に STEP4 になりました。このガイドラインには、<コンピュータによる毒性評価は、細菌を用いる変異原性試験の結果を予測する (Q) SAR 法を用いて実施すべきである>と明記されており、この予測結果がその後の開発方針・申請スケジュールに大きな影響を与えることが考えられます。



今回の講演会では、最初にガイドライン作成メンバーである本間先生より本ガイドラインの経緯、進捗も含め総合的にご講演いただきました。その後、毒性評価を予測するソフトウェアを開発 / 販売しているベンダーの皆様へ ICH M7 対応の製品説明、規制当局対応等に関する報告を頂戴しました。

最後に、毒性学的な評価について、中川先生にご講演いただきました。今回は M7 対応のソフトウェア、ハザード評価の要件について理解を深めたいとの思いから講演会を企画しましたが、安全性関連部署からの想定以上にご参加いただき、さまざまな論点から討議ができました。また、懇親会にも数多くの方々から参加され、手狭なデモブースとなりましたが、ソフトウェアに直接触るながら活発な議論の様子が見受けられました。本間先生、中川先生からは発表資料の配布版を頂きました。ご希望の方は事務局までご連絡ください。

日時：2014年5月16日（金）13:15 - 18:00

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：中嶋 久士（興和（株））、嶋根 みゆき（中外製薬（株））、福澤 薫（みずほ情報総研（株））

プログラム：

- (1) 13:20 - 14:20 「医薬品中に存在する遺伝毒性不純物の評価と管理」
本間 正充（国立医薬品食品衛生研究所）
- (2) 14:20 - 14:50 「Lhasa Knowledge Suite を活用した不純物の
遺伝毒性リスク評価」
小板橋 佑介（CTC ライフサイエンス株式会社）
- (3) 15:05 - 15:35 "MULTICASE Inc and challenges of ICH M7
related assessment of genotoxic impurities"
Roustem D Saiakhov (Multicase Inc.)
- (4) 15:35 - 16:05 「ADMEWORKS を活用した ICH M7 遺伝毒性
リスク評価への対応」
北島 正人（株式会社富士通九州システムズ）
- (5) 16:05 - 16:35 「Leadscope Model Applier を活用した ICHM7 ハザード
評価要件への対応」
茂木 邦雄（CTC ライフサイエンス株式会社）
- (6) 16:50 - 17:20 "*In silico* assessment of difficult to predict genotoxic
impurities in the context of ICH M7 guidelines"
Josep Prous, Jr. (Prous Institute for
Biomedical Research)
- (7) 17:20 - 17:45 「Ames 陽性不純物のフォロー評価としての *in vivo*
遺伝毒性試験」
中川 宗洋（株式会社 L S I メディエンス）
- (8) 17:45 - 18:00 総合討論



Roustem D Saiakhov 氏



Josep Prous, Jr. 氏



第 351 回 CBI 学会研究講演会

「三極の薬物相互作用ガイドラインを踏まえた薬物相互作用の予測の現状と将来展望」

開催報告：

臨床現場では治療目的を達成するために複数の薬物が投与される場合が多いが、これらの併用薬物間の相互作用により、薬効の減弱、副作用の発現につながる場合がある。したがって、薬物相互作用の有無、そしてその程度を医薬品開発段階で評価し、適切に注意喚起、情報提供した上で上市することが重要である。また薬物相互作用にかかわらず、飲食物やサプリメントとの相互作用が生じる場合もある。

しかしながら、医薬品の開発段階で併用される可能性のある全ての医薬品、飲食物及びサプリメント



との相互作用を検討するための臨床試験を実施して、併用時の有効性及び安全性を評価することは現実的ではないことから、いかに正確に薬物相互作用の有無及びその程度を予測するかが重要となってくる。

2012年2月にFDAより薬物相互作用のドラフトガイダンス、2012年6月にEMAより薬物相互作用ガイドラインが発出され、2014年には本邦でも「薬物相互作用の検討方法について」(平成13年6月4日、医薬審発第813号)の改訂版が発出される予定である。本シンポジウムでは、日米欧の薬物相互作用ガイドラインも

踏まえて、薬物相互作用予測の現状の理解を深め、将来展望について議論することを趣旨として、産官学それぞれの立場から薬物相互作用の予測についてご講演頂いた。

アカデミアの先生方からは最新の薬物相互作用予測方法について、企業の先生方からは薬物相互作用予測の実践とその課題について、規制当局の先生からは薬物相互作用予測の規制当局の考え方についての講演であった。講演のあとには総勢200名を超える参加者を交えた活発な議論がなされ、本シンポジウムを通して、薬物相互作用予測の現状への理解が深まり、また、正確な薬物相互作用予測へ向けた課題がより明確になったと考えられる。

シンポジウム後の懇親会には多くのシンポジウム出席者が参加し親睦を深め、有意義な時間を過ごし、1日に及ぶシンポジウムは盛況のうちに終了した。



日時：2014年6月19日(木) 10:00 - 17:50

場所：東京大学 弥生講堂一条ホール(東京都文京区弥生1-1-1)

世話人：杉山 雄一(理化学研究所)、佐藤 正延(医薬品医療機器総合機構)

プログラム :

- (1) 10:00 - 10:45 「薬物相互作用の予測についての総論 – Dynamic model を中心として–」
杉山 雄一 (理化学研究所)
- (2) 10:45 - 11:30 「薬物相互作用ガイドライン改訂における新規性およびモデリングの利用」
樋坂 章博 (千葉大学大学院薬学研究院)
- (3) 11:30 - 12:00 「代謝酵素の関わる薬物相互作用の予測」
伊藤 清美 (武蔵野大学薬学部)
- (4) 13:20 - 13:50 「トランスポーターが関与する複雑な薬物相互作用の予測」
前田 和哉 (東京大学大学院薬学系研究科)
- (5) 13:50 - 14:15 「Basic/Static モデルによる薬物相互作用予測の正確性について」
岩坪 隆史 (日本製薬工業協会 / アステラス製薬株式会社)



杉山雄一先生

樋坂章博先生

伊藤清美先生

前田和哉先生

岩坪隆史先生

- (6) 14:15 - 14:40 「OATP1B1 を介した薬物相互作用の予測 – *in vitro* 阻害試験に適したプローブ基質とは？」
野崎 芳胤 (エーザイ株式会社)
- (7) 14:40 - 15:05 「薬物相互作用予測への取り組み」
奥平 典子 (第一三共株式会社)
- (8) 15:05 - 15:30 「P-gp を介した薬物相互作用予測 – *in vitro* から算出される阻害定数のばらつきについて」 –」
石黒 直樹 (日本ベーリンガーインゲルハイム株式会社)
- (9) 15:50 - 16:20 「医療用医薬品添付文書への薬物相互作用の記載について」
永井 尚美 (医薬品医療機器総合機構)
- (10) 16:20 - 16:50 「薬物相互作用ガイドラインの運用について」
佐藤 正延 (医薬品医療機器総合機構)
- (11) 16:50 - 17:50 総合討論



野崎芳胤先生

奥平典子先生

石黒直樹先生

永井尚美先生

佐藤正延先生

今後の研究講演会 予定

第 354 回 CBI 学会研究講演会

「CBI 学会夏の合宿 2014 in 道後 / 松山」

日時：2014 年 8 月 8 日（金） - 9 日（土）

場所：松山大学（松山市文京町）、にぎたつ会館（松山市道後）

世話人：水間 俊（松山大学）、小長谷 明彦（東京工業大学）、湯田 浩太郎（インシリコデータ）

第 355 回 CBI 学会研究講演会

「フェノタイプスクリーニング 古くて新しい創薬手法」

日時：2014 年 9 月 12 日（金） 13:20 - 17:50

場所：東京大学 山上会館 大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：相良 武、田口 淳子（大鵬薬品工業）、新美 達也（アステラス製薬）、片倉 晋一（第一三共 RD ノバーレ）

第 356 回 CBI 学会研究講演会

「動き出すアカデミア創薬

－アカデミア創薬シーズの活用、オールジャパンの創薬体制を目指して－

日時：2014 年 12 月 2 日（火） 13:15 - 17:45

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル 北館タワー C 7 階 大阪イノベーションハブ

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



CBI 学会誌 第 2 卷 第 3 号

2014 年 7 月 31 日 発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 高橋 まき 町田 規子

湯川 真澄 小宮山 直美

発行：CBI 学会

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

