

# 情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第 5 卷第 1 号

2017 年 2 月 28 日発行

## 目次

(1) CBI 学会 2017 年大会開催概要 .....	1
(2) CBI ジャーナル便り (8) .....	4
(3) 講演会報告・予告 .....	6
(4) 委員会報告 .....	12



## CBI 学会 2017 年大会

近年の科学・産業界のオープンイノベーションの試みによって、その成果が確実に創薬分野にも表れています。本学会においても2年続けて創薬のオープンイノベーションと関連する学問分野に焦点を当てて開催され、*in silico* 創薬の実用性が報告されています。*in silico* 創薬のみならず広い意味での計算創薬の進捗を加速するため、CBI 学会 2017 年大会も創薬オープンイノベーションを主題とし、その中でも特に、データ階層の異なる研究の融合に焦点を当てることにします。

創薬が様々な業種の集合体として成り立つ総合産業であることから、創薬プロセスにおいて様々な階層のデータを利用しています。化合物やタンパク質の分子構造情報、ゲノム情報、モデル動物情報、オミックス情報、個体（患者）情報など多階層から成っています。互いに異なる A と B から融合したより良い C という結論を導く弁証法により科学が発達したことに倣えば、異なるデータ階層の融合研究こそがオープンイノベーションのカギと言えるでしょう。近年の AI ブームでわかるように、多階層のデータをひとまとめにして、潤沢な計算資源を利用して機械学習・推論するアプローチが注目を集めています。生命科学において正例の定義が困難である、異なる単位のデータを同等に混在させるなど、欠点も指摘されていますが、このブームは、異なる階層のデータを鳥瞰した結論を得たいという要求に対して一つの回答を与えています。

コンピュータ上のデータ融合とは異なり、人間同士の研究テーマの融合は困難を伴います。職人気質を尊重する日本の風土において、一つの方針の専門的な深い知識が尊重されますが、一方、井の中の蛙、淫している、という言葉があります通り、その弊害も認識されています。様々な研究分野の研究者が過去の成功体験を乗り越える勇気と決断によって、新たな成功に向け一歩を踏み出し、最新状況や今後のニーズを共有し議論を深めた上で、新しい融合研究領域を創造する突破口を得る機会になれば幸いです。

アカデミア、製薬企業でオープンイノベーションによる創薬を推進している方々、あるいは興味をお持ちの方の積極的な参加をお願いいたします。

## CHEM-BIO INFORMATICS SOCIETY CBI ANNUAL MEETING 2017

会期：2017 年 10 月 3 日（火）- 5 日（木）  
 会場：タワーホール船堀（東京都江戸川区船堀 4-1-1）  
 テーマ：データ駆動型研究が拓く創薬  
 大会長：堀本 勝久（産業技術総合研究所）  
 実行委員長：広川 貴次（産業技術総合研究所）  
 大会 HP：<http://cbi-society.org/taikai/taikai17/index.html>  
 お問い合わせ：cbi2017@cbi-society.org

データ駆動型研究が拓く創薬

## プログラム

### 講演

- ◇ 10月3日(火)
  - ・ 大会長講演  
堀本 勝久 (産業技術総合研究所)
- ◇ 10月3日(火)「企業におけるデータ駆動型研究」
  - ・ プレナリー講演  
舩屋 圭一 (ペプチドリーム株式会社)
  - ・ 招待講演  
安藤 達哉 (武田薬品工業株式会社)  
山崎 一人 (大日本住友製薬株式会社)  
他、講師交渉中
- ◇ 10月4日(水)「AI、ビッグデータ」
  - ・ プレナリー講演  
辻井 潤一 (産業技術総合研究所)  
杉山 将 (理化学研究所 / 東京大学)  
柳田 敏雄 (情報通信研究機構)
  - ・ 招待講演  
岡野原 大輔 (株式会社 Preferred Networks)  
津田 宏治 (東京大学)  
菊地 淳 (理化学研究所)
- ◇ 10月5日(木)「アカデミア創薬に向けた基盤技術と応用」
  - ・ プレナリー講演  
五島 直樹 (産業技術総合研究所)  
上田 泰己 (東京大学)  
杉田 有治 (理化学研究所)
  - ・ 招待講演  
本間 光貴 (理化学研究所)  
山西 芳裕 (九州大学)  
尾嶋 拓 (理化学研究所)

### フォーカストセッション

#### チュートリアル

#### 市民講座

2016年大会風景



## 参加登録

事前登録期間：2017年4月14日(金)～9月25日(月)

参加費(税込)

区分		1. 参加登録(早期割引) (2017年9月8日まで)	2. 参加登録(当日料金) (2017年9月9日以降)
情報計算化学生物学会 (CBI学会) 会員	個人会員	12,000円	17,000円
	法人会員		
	学生会員	2,000円	5,000円
非会員	一般	20,000円	25,000円
	学生	5,000円	5,000円
招待券利用者		無料	無料

## ポスター投稿

受付期間：2017 年 4 月 14 日（金） - 7 月 31 日（月）

投稿募集分野：

- (1) 分子認識と分子計算 (2) インシリコ創薬 (3) バイオインフォマティクスとその医学応用  
(4) 医薬品研究と ADMET (5) 上記に属さない先進的研究

## 大会組織委員会

大会長：堀本 勝久（産業技術総合研究所）

<大会実行委員会>

実行委員長：広川 貴次（産業技術総合研究所）

石川 智久（NPO 法人地方再興・個別化医療支援）

岡部 隆義（東京大学）

片倉 晋一（第一三共 RD ノバーレ株式会社）

河合 隆利（エーザイ株式会社）

小長谷 明彦（東京工業大学）

相良 武（大鵬薬品工業株式会社）

高岡 雄司（ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社）

多田 幸雄（東京工業大学）

田中 成典（神戸大学）

田中 博（東北メディカル・メガバンク機構／  
東京医科歯科大学）

福澤 薫（星薬科大学）

本間 光貴（理化学研究所）

水間 俊（松山大学）

<大会企画委員会>

奥野 恭史（京都大学大学院）

豊柴 博義（武田薬品工業株式会社）

西中 重行（大日本住友製薬株式会社）

中津井 雅彦（京都大学大学院）

<プログラム委員会>

委員長：石田 誠一（国立医薬品食品衛生研究所）

広川 貴次（産業技術総合研究所）

多田 幸雄（東京工業大学）

石川 岳志（長崎大学）

宮本 秀一（崇城大学）

山岸 賢司（日本大学）

福澤 薫（星薬科大学）

片倉 晋一（第一三共 RD ノバーレ株式会社）

河合 隆利（エーザイ株式会社）

高岡 雄司（ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社）

平山 令明（東海大学）

荻島 創一（東北メディカル・メガバンク機構）

Paul Horton（産業技術総合研究所）

一石 英一郎（国際医療福祉大学病院）

小西 智一（秋田県立大学）

田中 博（東北メディカル・メガバンク機構／  
東京医科歯科大学）

美宅 成樹（名古屋大学名誉教授）

茂櫛 薫（順天堂大学）

森岡 涼子（国立研究開発法人国立環境研究所）

水間 俊（松山大学）

石川 智久（NPO 法人地方再興・個別化医療支援）

粕谷 敦（第一三共株式会社）

菅野 清彦（東邦大学）

本間 光貴（理化学研究所）

植沢 芳広（明治薬科大学）

湯田 浩太郎（株式会社インシリコデータ）

小長谷 明彦（東京工業大学）

木賀 大介（早稲田大学）

田中 成典（神戸大学）

萩谷 昌己（東京大学）

福井 一彦（産業技術総合研究所）

山村 雅幸（東京工業大学）

関嶋 政和（東京工業大学）

多田 隈 尚史（大阪大学蛋白質研究所）

中嶋 久土（興和株式会社）

中村 光浩（岐阜薬科大学）

## 企業出展募集

- (1) 展示ブース
- (2) スポンサーセッション・ランチョンセミナー・スポンサー企業企画セッション
- (3) 予稿集（パンフレット）広告掲載
- (4) カタログ設置
- (5) 寄付



詳細は大会ホームページをご参照ください <http://cbi-society.org/taikai/taikai17/index.html>

# CBI ジャーナル便り (8)

**CBI** Chem-Bio Informatics Journal  
Chem-Bio Informatics Society

## ◆ シミュレーションのみの論文も積極的に受理しております

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

## ◆ 論文受付から掲載までの期間短縮への対応

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



## ◆ 速報 CBI ジャーナル新掲載論文

「骨格及び構造活性相関傾向の類似性に基づく直接及び間接的構造活性相関転移による  
新規構造推薦法：活性化第十因子阻害剤研究への適用」

石原 司、森 健一、宗像 亮介、森友 紋子  
アステラス製薬株式会社

要旨：本報告では、構造活性相関 (SAR) データベースからの SAR 転移、ならびに、引き続き構造推薦に基づく新規医薬候補化合物設計手法について述べる。本法は、1) SAR 探索中の化合物群ならびに参照 SAR データベースからの Matched Molecular Series (MMS) 解析、2) 化合物骨格及び SAR 類似性に基づく類縁 MMS の解析、そして、3) 新規化合物の構造発生と協調フィルタリングに基づく活性推算の三段階にて構成される。第二段階では、ネットワーク解析に基づき、直接的あるいは潜在的な類縁 MMS の検出が可能となる。本法を血液凝固活性化第十因子阻害剤探索に遡及適用した結果、常法的な定量的構造活性相関手法と比較し、高い精度で化合物活性を推算することが示された。更に、本法により、タンパク-リガンド複合体の構造情報を用いず、SAR 情報のみを基に、指定するリガンドの部分構造に代替して同一のタンパクポケット領域を占有する部分構造が推薦されることが示された。

## 「SBDD と classical QSAR 解析によるチミンホスホリラーゼ阻害薬の分子設計」

多田 幸雄<sup>1</sup>、数野 秀樹<sup>2</sup>、佐藤 勉<sup>2</sup>、鈴木 則彦<sup>2</sup>、江村 智弘<sup>2</sup>、矢野 伸吾<sup>2</sup><sup>1</sup> 東京工業大学、<sup>2</sup> 大鵬薬品工業株式会社

要旨：トリフルオロチミン (TFT) は抗腫瘍活性をもつが、チミンホスホリラーゼ (TP) により不活性なチミンに容易に代謝されるので、TFT 単独では満足な臨床での抗腫瘍効果を示すことができない。ヒトの TP (HTP) はヒトのピリミジンヌクレオシドホスホリラーゼの主な酵素である。従って、TFT の抗腫瘍活性を維持するには HTP 阻害薬を開発する必要がある。ここでは、SBDD と classical QSAR による HTP 阻害薬のドラッグデザインプロセスを示す。チミンがシード化合物、5-クロロウラシル (3) がリード化合物として選択された。リード化合物 (3) の C6 位にイミノ基の導入は阻害活性を向上した。その結果 5-chloro-6-[1-(2-iminopyrrolidinyl) methyl] uracil hydrochloride (TPI) を臨床試験候補化合物とした。そして、TAS-102( 配合モル比 TFT:TPI = 1:0.5) はトリフルリジン / チピラシル (ロンサーフ) として日本、欧州、米国で転移性直腸がんの治療薬として認可されている。

CBI ジャーナル編集委員会

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

## CBI 学会からのお知らせ

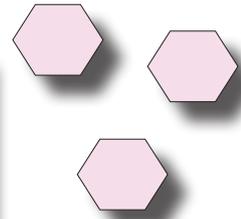
## ★会員管理システムが新しくなりました

- ▼講演会・大会の参加登録は新しいシステムで受け付けます。
- ▼会員ページより、新しくパスワードを設定し、過去の情報をご確認・更新があればお願い致します。
- ▼詳細はホームページでご確認ください。

## ★2017 年の関連の研究集会 (協賛) のご紹介

- ▼ 3月3日 「第 17 回 IPAB シンポジウム「機械学習と人工知能」  
会場：東京工業大学キャンパス・イノベーションセンター (田町)  
1階 国際会議室 (東京都港区芝浦3-3-6)
- ▼ 6月8日 -9日 「日本コンピュータ化学会 2017 春季年会  
会場：東京工業大学大学院社会理工学研究科棟  
大岡山西 9 号館 2 階 (東京都目黒区大岡山 2-12-1)
- ▼ 11月15日 -16日「国際シンポジウム 第5回ケモインフォマティクス秋の学校」  
会場：奈良春日野国際フォーラム・能楽ホール

# 講演会 記録



## 第 377 回 CBI 学会講演会

### 「fMRI 脳機能イメージング：新しいバイオマーカーを求めて」

日時：2016 年 11 月 25 日（金）13:00-18:00

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル タワー C9 階 VisLab OSAKA(大阪市北区大深町 3-1)

世話人：田口 隆久（国立研究開発法人情報通信研究機構（NICT）脳情報通信融合研究センター（CiNet））

#### プログラム：

- (1) 13:00-13:15 開催の挨拶
- (2) 13:15-14:05 「BOLD-fMRI と脳の微細構造変化とで示す脳の可塑性を通して各種指標の脳表現を見る」  
小川 誠二（CiNet 特別顧問、東北福祉大学特任教授）
- (3) 14:05-14:50 「統合失調症患者の脳内ネットワーク ～グラフ理論で  
見えてくる新しいバイオマーカーの可能性～」  
下川 哲也（NICT・CiNet 研究員）
- (4) 15:10-15:55 "Biomarkers from network science for the fMRI analysis of pain"  
Kenji Leibnitz（NICT・CiNet 主任研究員）
- (5) 15:55-16:40 「ニューロフィードバックによる恐怖記憶の消去」  
小泉 愛（NICT・CiNet 研究員）
- (6) 16:40-17:25 「脳活動予測モデルを介した脳内知覚・意味表現の定量可視化題」  
西田 知史（NICT・CiNet 研究員）
- (7) 17:25-17:55 まとめと総合討論

#### 開催報告：

近年の脳機能解析技術の進歩により、脳内情報を取り出したり（デコーディング）、人間の脳に情報を返す（ニューロフィードバック）こともできるようになってきた。脳は、神経細胞の作る複雑な回路（ネットワーク）で情報処理をしていると考えられているが、この機能的構造を明らかにし、脳機能の可視化（イメージング）も可能になっている。このような研究は、単なる基礎研究としての脳科学に留まらず、創薬も含むいろいろな分野において産業応用が視野に入ってきている。この講演会では、情報通信研究機構・脳情報通信融合研究センター（CiNet）の最新の研究を紹介しながら、創薬分野での成果活用の可能性について議論した。

人間の脳機能を非侵襲的にできる MRI（核磁気共鳴イメージング）技術がこの発展に大きな貢献をしています。世界中で広く脳機能計測に用いられている BOLD 信号計測の発明者である小川誠二先生は、基調講演として、脳機能の可塑的部位変化と心理特性の関係解析について紹介した。下川研究員、Leibnitz 研究員から fMRI データを用いたネットワーク解析技術により、脳の病的状態（統合失調症や慢性疼痛）の可視化に成功した成果が示された。小泉研究員からは、ニューロフィードバック技術を用いて、恐怖対象を提示することなく恐怖反応を和らげる研究成果を、西田研究員からは、脳機能イメージング情報に数理化モデルを適用し、知覚情報や認知情報のデコーディングに成功した研究成果を紹介した。これらの研究は、実際の創薬現場での応用にはさらに精度を上げる必要がある

るものの、将来的な応用可能性については参加者との共通理解が生まれた。AI 技術との組み合わせも視野に入っており、これらの成果の今後の発展が期待できる。



小川誠二先生



下川哲也先生



Kenji Leibnitz 先生



小泉愛先生



西田知史先生

## 第 378 回 CBI 学会講演会

### 「薬物動態、組織移行性・薬効・副作用予測を目指した

### 創薬支援インフォーマティクスシステムの構築に向けて」

日時：2016 年 12 月 8 日（火）10:30-17:40

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：杉山 雄一（理化学研究所）、楠原 洋之（東京大学大学院薬学系研究科）

#### プログラム：

- (1) 10:30-10:50 はじめに  
杉山 雄一（理化学研究所）
- (2) 10:50-11:35 「化学構造よりトランスポーターの基質特性を予測す；サポートベクターマシンの利用」  
年本 広太（理化学研究所）
- (3) 11:35-12:20 「化合物の化学構造に基づく薬物の主要クリアランス経路の予測」  
前田 和哉（東京大学大学院薬学系研究科）
- (4) 13:30-14:15 「多階層生体機能モデリング & シミュレーションプラットフォームを利用した薬物動態予測研究」  
山下 富義（京都大学）
- (5) 14:15-15:00 「*in vitro* データを基にした中枢での受容体占有率の予測」  
楠原 洋之（東京大学大学院薬学系研究科）
- (6) 15:20-16:05 「低分子化合物による肝障害誘発特性の予測」  
鈴木 洋史（東大病院・薬剤）
- (7) 16:05-16:50 「Virtual clinical study (VCS) による臨床開発の支援」  
杉山 雄一、年本 広太（理化学研究所）
- (8) 16:50-17:40 総合討論

#### 開催報告：

医薬品の効果や有害事象の発現は、薬力学的要因と薬物動態学的要因に分けて捉えることができる。同様に、さらに下位の要素にブレイクダウンしていくことで、階層的に理解することが可能である。こうした階層構造に基づくことで、個体レベルでは *in silico* 予測が難しい現象であっても、下位の階層に属する個々の要素に対して構造活性相関解析を実施し、それら予測結果を積み上げて再構築することで、化合物の化学構造から個体レベルでの事象に関する *in silico* 予測への道が開くことができるものとする。本講演会では、薬物動態の *in silico* 予測に加

えて、薬力学的要因をモデルに取り込むことで、薬物応答性に関するシミュレーション研究を実践している6名の先生方に、最新の研究成果を紹介していただいた。講師含めて119名が参加する会となり、このトピックに対する関心の高さを伺うことができる。

年本および前田は、化合物の化学構造情報に立脚して、体内動態特性を推定する方法を紹介した。薬物の簡単な物性を表すパラメータ群（分子量・電荷・脂溶性）や非結合形薬物分率の情報、さらにはより複雑な構造記述子を取捨選択して用いながら、矩形領域法あるいはサポートベクターマシンによる判別機を構築することで、主要な排泄経路（肝取り込み、腎排泄、および複数の薬物代謝酵素分子種ごとの代謝）や複数のトランスポーターに対する基質性について高精度な予測が可能であることを示した。

山下は、生物を多階層的に理解するため、PhysioDesigner を利用した数理モデリングの取り組みを紹介し、薬物などによる刺激時の細胞内カルシウムオシレーションに関するシミュレーションが可能であることを示すと共に、ヒト肝細胞を用いた *in vitro* 試験の結果に基づいてパラメータ設定された PXR を介した CYP3A4 誘導倍率に関する機構論的なモデルを用いることで、ヒト臨床データが説明可能であることを示した。



杉山雄一先生



年本広太先生



前田和哉先生



山下富義先生



楠原洋之先生



鈴木洋史先生

楠原は、脳内の標的タンパクに対する結合解離に関するパラメータを考慮することで、薬物服用後の脳内の受容体占有率の時間推移を合理的に説明できることを示した。オフターゲットタンパクとの相互作用も考慮可能であり頑健性の高い方法といえる。一方、血液脳関門を介した能動輸送については、予測の正確さを評価するためには臨床データが不足しており、今後の研究の余地を残していることが示された。

鈴木は、薬物誘導性肝障害の中でも特異体質性に分類される肝障害では、HLA (human leukocyte antigen) が関与することは遺伝子多型との関連から推察されているが、その原因として、薬物が直接 HLA 分子と結合することで、提示されるペプチドのレパートリーが変動することが要因となりうること、また薬物誘導性肝障害の発現には、障害発現者の炎症性サイトカインの血漿中濃度の測定結果により、生体側の炎症状態もリスクファクターとなることが示された。さらに、薬物誘導性肝障害時における肝細胞の酸化ストレスに関わる複数のバイオマーカーをモニターしながら、動物実験ではあるが、酸化ストレスを抑制することで肝障害の発現を抑制可能であることが報告された。今後、HLA 分子のペプチドレパートリーの変動がどのように引き起こされるかを *in silico* 解析により予測する研究や、生体側のメタボロミクスデータと肝障害発症との関連に関する予測研究への展望が開けている。

杉山は、自身が開発している Virtual clinical study の考え方に基づくシミュレーション研究を紹介した。イリノテカンのように複雑な体内動態を示す薬物の事例であっても、生理学的薬物速度論モデルと cluster Newton 法を利用して、モデル上の速度論パラメータセットの候補を網羅的に推定することで、できる限り恣意性をなくした解析を行うと共に、さらに薬物相互作用や薬理遺伝学の情報を統合するプラットフォームとして活用することで、頑健性の高いモデル構築を目指す手法を紹介した。

化合物の化学構造に基づいて、個々の薬物について、ある程度の信頼性をもってヒトにおける主排泄経路やトランスポーターの基質性を推定することが可能になった点、*in vitro* 実験から得られる情報を統合することで、*in silico* 予測精度が改善されることを共有することができた。こうした情報に基づいて、体内動態のポピュレーションデータの推定、それに薬効モデルを関連づけたシミュレーションを行い、治験デザインを最適化することで、第3相試験での成功確率が高まるものと期待される。会場からは、創薬支援インフォマティクスシステムとして、医薬品開発の早期に行われる化合物の誘導体化の段階で、いかに効果を維持したまま動態特性を最適化するかなど、*in silico* 解析による支援の必要性も指摘された。構造展開に活用するためには、定量的な構造活性相関が不可欠である点、学習化合物群に占めるケミカルスペースと当該化合物群との重複度など様々な技術的課題があることを確認し、さらに進化した創薬支援インフォマティクスシステムの開発に向けて、引き続き研究が必要であるとの結論に至った。



## 第 379 回 CBI 学会講演会

### 「モレキュラーダイナミクスによる相互作用の評価～生体分子のシミュレーションを目指して～」

日時：2017年1月27日（金）13:15-17:40

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：石川 誠（日産化学工業株式会社）、江頭 啓（小野薬品工業株式会社）、谷村 直樹（みずほ情報総研株式会社）

プログラム：

- (1) 13:15-13:20 はじめに
- (2) 13:20-14:00 「MD シミュレーションによる活性型 GPCR・アゴニスト複合体の構造予測の試み」  
市原 収（シュレーディングー株式会社）
- (3) 14:00-14:40 「分子動力学シミュレーションによる細胞膜近傍での生体分子の拡散現象の解明」  
山本 詠士（慶應義塾大学）
- (4) 14:40-15:20 「水界面における分子構造の分子シミュレーション研究」  
石山 達也（富山大学）
- (5) 15:40-16:20 「一分子 FRET 計測を利用したタンパク質のマイクロ秒ダイナミクスの解析」  
石井 邦彦（理化学研究所）
- (6) 16:20-17:00 「溶媒和概念の普遍化に基づくソフト分子集合系の自由エネルギー解析」  
松林 伸幸（大阪大学）
- (7) 17:00-17:30 「エネルギー表示法の蛋白質-低分子結合親和性予測への応用」  
谷村 隆次（東レ株式会社）
- (8) 17:30-17:40 終わりに

## 開催報告：

今回の講演会は、継続的なテーマとして生体分子のシミュレーションに関する講演を企画した。特に、生体分子のシミュレーションを目指したモレキュラーダイナミックスによる相互作用の評価に関して、各講師から発表がなされた。

シュレーディンガー株式会社市原先生からは GPCR への取り組みとして、メタダイナミックスと拘束条件を経験的に組み合わせた内容に関して講演して頂いた。特に、メカニズムの仮説による検証方法としてのシミュレーション方法を説明頂いた。慶応大学山本先生からは水の動きに着目したダイナミックスの挙動について講演して頂いた。また、分子拡散評価の着眼点に関して系統的に説明頂いた。富山大石山先生からは、和周波発生 (sum frequency generation, SFG) 分光法を利用したスペクトルとシミュレーションとの連携に関する研究を講演頂いた。シミュレーションと分析スペクトルとの対比を行い、各種相互作用の挙動を解析する上で有用な知見を説明頂いた。実験系のダイナミックスの講演として、理研石井先生から FRET 計測を利用したタンパク質のマイクロ秒ダイナミックスの解析を中心に講演頂いた。最後に、溶媒和自由エネルギー評価方法として、阪大松林先生からその基本概念を講演して頂き、その応用として東レ谷村先生から蛋白 - リガンドの相互作用評価に関して講演頂いた。エネルギー表示法の有効性を伺うことができた講演であった。



相互作用のダイナミックスを定量化するだけでなく計測を利用することで更なるタンパクへの知見が広がることを伺える内容であった。特に、測定 (分析技術) との連携は、実験と計算の相互の技術を組み合わせて行く事で、相互作用の評価とその機構解明に大きく貢献できることを実感できる内容であった。



市原収先生



山本詠士先生



石山達也先生



石井邦彦先生



松林伸幸先生



谷村隆次先生

## 今後の講演会 予定

### 第 382 回 CBI 学会講演会

「人工知能と創薬－創薬現場で備えておくべきこと－」

日時：2017 年 3 月 2 日（木）13:20-17:45

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

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

### 第 383 回 CBI 学会講演会

「翻訳後修飾研究のフロンティアとそれを支える基盤技術－創薬 R&D への期待－」

日時：2017 年 5 月 12 日（金）

場所：グランフロント大阪ナレッジキャピタル

世話人：坂田 恒昭（大阪大学）、水口 賢司（医薬基盤・健康・栄養研究所）

### 第 384 回 CBI 学会講演会

「核酸創薬」

日時：2017 年 5 月 25 日（木）

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 1 階国際会議室

世話人：高土居 雅法（杏林製薬株式会社）、嶋根 みゆき（中外製薬株式会社）、  
片倉 晋一（第一三共 RD ノバーレ株式会社）

### 第 385 回 CBI 学会講演会

「PK/PD-ADME-DDI サイエンスの最近の進歩 ～ Quantitative Systems  
Pharmacology (QSP) との連結～」

日時：2017 年 6 月 9 日（金）

場所：東京大学医学図書館 333 会議室

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

### 第 386 回 CBI 学会講演会

「創薬を支援する構造データベースの応用」

日時：2017 年 7 月 21 日（金）

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター 1 階国際会議室

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

# 委員会報告

## 【創薬研究会運営委員会】

### 第 26 回創薬研究会運営委員会

日時：2017 年 1 月 27 日 (金) 10:00-12:20

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(日産化学工業)、江頭 啓(小野薬品工業)、岡田 興昌(田辺三菱製薬)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦(菱化システム)、小長谷 明彦(東京工業大学)、相良 武(大鵬薬品工業)、佐藤 秀行(オープンアイ・ジャパン)、嶋田 朋嘉(帝人ファーマ)、嶋根 みゆき(中外製薬)、高土居 雅法(杏林製薬)、田上 宇乃(味の素)、多田 幸雄(東京工業大学)、谷村 直樹(みずほ情報総研)、谷村 隆次(東レ)、徳良 誠健(大正製薬)、中嶋 久土(興和)、新美 達也(アステラス製薬)、緑川 淳(ワールドフュージョン)、小澤 陽子(CBI 学会事務局)

欠席者(敬称略)：岡部 隆義(東京大学)、田中 博(東北大学 ToMMo)、本間 光貴(理化学研究所)、松本 俊二(富士通)、水間 俊(松山大学)

議題：(1) CBI 学会法人会員入会約款の変更について  
(2) 2016 年講演会参加者数と収支(報告)  
(3) 山上会館会議室等の使用制限へのご協力お願いの件  
(4) 講演会企画進捗状況の報告  
(5) グループ討議

資料：(1) CBI 学会法人会員入会約款  
(2) 2016 年講演会参加者数と収支  
(3) 【通知】山上会館会議室等の使用制限へのご協力お願い  
(4) 講演会予定一覧  
(5) 法人会員リスト(各社)



## 【関西部会】

### 第 11 回関西部会運営委員会

日時：2016 年 11 月 25 日 (金) 10:00-12:00

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

出席者(敬称略)：小長谷 明彦(東工大)、六嶋 正知(塩野義製薬)、山崎 一人(大日本住友製薬)、水口 賢司(医薬基盤)、木下 誉富(大阪府立大)、志水 隆一(都市活力研究所)、中嶋 久土(興和)、田中 成典(関西部会長、神戸大)、牛尾(書記、神戸大)

欠席者(敬称略)：坂田 恒昭(関西副部会長、大阪大、塩野義製薬)、森 浩禎(奈良先端大)、田口 隆久(情報通信研究機構)、森 一郎(神戸大)、鶴田宏樹(神戸大)、正城 敏博(大阪大)、奥野 恭史(京都大)、岡田 随象(大阪大)

議題：(1) 次回(2017 年 2 月 3 日(金))の CBI 学会関西部会講演会について  
(2) 次回以降の講演会の開催について  
(3) 今後の企画・運営、その他

## 【2017 年大会 プログラム委員会】

### 第 1 回 2017 年大会プログラム委員会

日時：2017 年 1 月 10 日 (火) 15:00-17:00

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

出席者 (敬称略)：石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、多田 幸雄 (東京工業大学)、石川 岳志 (長崎大学、スカイプ参加)、福澤 薫 (星薬科大学)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、高岡 雄司 (ダッソーシステムズ・バイオピア)、荻島 創一 (東北大学 東北メディカル・メガバンク機構、スカイプ参加)、Paul Horton (産業技術総合研究所)、小西 智一 (秋田県立大学、スカイプ参加)、美宅 成樹 (名古屋大学名誉教授)、茂柳 薫 (順天堂大学)、森岡 涼子 (国立環境研究所)、水間 俊 (松山大学、スカイプ参加)、粕谷 敦 (第一三共)、菅野 清彦 (東邦大学)、湯田 浩太郎 (インシリコデータ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、山村 雅幸 (東京工業大学、スカイプ参加)、多田 隈 尚史 (大阪大学蛋白質研究所)、中嶋 久士 (興和)、中村 光浩 (岐阜薬科大学、スカイプ参加)、関嶋 政和 (東京工業大学) 小澤 陽子 (CBI 学会事務局)、小宮山 直美 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：宮本 秀一 (崇城大学)、山岸 賢司 (日本大学)、河合 隆利 (エーザイ)、平山 令明 (東海大学)、一石 英一郎 (国際医療福祉大学病院)、田中 博 (東京医科歯科大学)、石川 智久 (NPO 法人地域再興・個別化医療支援)、本間 光貴 (理化学研究所)、植沢 芳広 (明治薬科大学)、木賀 大介 (早稲田大学)、田中 成典 (神戸大学)、萩谷 昌己 (東京大学)、福井 一彦 (産業技術総合研究所)

議題：(1) プログラム委員の自己紹介

(2) 2017 年大会の説明

(3) 2016 年大会の報告

(4) フォーカストセッションについて

(5) ポスター発表について

(6) フォーカストセッションの形式について

(7) プログラム委員の追加について

資料：(1) 2017 年大会プログラム委員名簿

(2) 2017 年大会開催概要

(3) 2016 年大会 FS 一覧

(4) 大会プログラム概要

(5) ポスター投稿募集要項案

(6) 経緯の説明

(7) おおまかな日程表

## 【執行部会】

### 第 27 回執行部会

日時：2016 年 12 月 9 日 (金) 18:00-17:40

場所：AP 西新宿 G 会議室 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 5 階)

出席者 (敬称略)：田中 博 (東北メディカルメガバンク機構/東京医科歯科大学)、石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、岡部 隆義 (東京大学創薬機構)、河合隆利 (エーザイ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、多田 幸雄 (東京工業大学)、本間 光貴 (理化学研究所)、小澤 陽子 (事務局)、塚田 優子 (事務局)

欠席者 (敬称略)：石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、相良 武 (大鵬薬品工業)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、田中 成典 (神戸大学)、広川 貴次 (産業技術総合研究所)、福澤 薫 (日本大学)、水間 俊 (松山大学)

議題：(1) 2016 年大会報告

(2) 3 月の総会の日程について

(3) 総会議案策定

(4) 会長選挙規定の変更について

(5) 法人登録個人会員の取り扱いについて

資料：(1) 2016 年大会報告

(2) 2016 年大会収支 (見込)

(3) 2016 年大会反省点・留意点 (スタッフからの意見)

(4) 総会議案策定資料 (講演会参加者人数および収支、予算案)

(5) 会長選挙規定

(6) 会員管理システム変更に伴う、会告の配信について



---

## CBI 学会誌 第 5 卷 第 1 号

2017 年 2 月 28 日 発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 藤田 真澄

塩塚 真理 小宮山 直美

発行：CBI 学会

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

