

# CBI学会誌



第 10 卷第 1 号

2022 年 3 月 1 日発行

## CBI 学会からブレイクスルーを

相田 美砂子

広島大学 学長特命補佐（研究人材育成担当）  
特任教授

新型コロナウイルス感染症（COVID-19）の感染拡大は、いまだ、先の見えない状況にあり、社会活動への様々な制限、それに起因する様々な影響が続いています。教育機関においても、感染拡大防止を最優先とする対応が続いており、児童・生徒・学生たちの活動に大きな影響が出ています。若手研究者の海外派遣や海外からの研究者招聘も延期せざるを得ない状況が続いています。

今から一年前（2021 年初め頃）、2020 年は日本の社会全体が古い非効率的な社会構造のまま変わっていないことが明確になった年だった、2021 年は「デジタルトランスフォーメーション」（DX）が急速に進展するに違いない、と思いました。ところが、DX への関心は確かに急速に大きくなりましたが、それが社会に、あるいは研究の場に、浸透しつつあるか、というと、そうは思えない、と言わざるをえないまま 1 年が過ぎ、もう 2022 年の春を迎えようとしています。日本の社会は、なかなか変わらないものだ、とあらためて実感しています。

CBI 学会との私の初めての出会いは、まだ、通称「CBI 研究会」だった頃、まだ CBI 事務局が東京都の臨床研にあった頃、私がまだ東京築地の国立がんセンター研究所の研究者だった頃、です。私は 1998 年 10 月に広島大学に異動しました。2007 年に、CBI 学会の年次大会として初めて、東京から遠く離れ、広島で開催することになり、その実行委員長を務めさせていただきました。当時の最終報告書を探し出したところ、次のように記載していました。

CBI 学会 2007 年大会 ～量子化学・計算化学から生命へ～

会期：2007 年 10 月 3 日（水）～ 5 日（金） / 参加者：一般 243 名、学生 180 名

会場：広島大学（東広島キャンパス）サタケメモリアルホール

交通不便な広島大学（東広島キャンパス）での開催だったため、参加者数や企業展示数への影響を心配していましたが、多くの方々に参加していただきました。（当時はオンライン参加という手段があることなど思いもよらない頃でした。）参加して下さったみなさまに、懇親会で広島（とくに、西条）の日本酒を楽しんでいただいたのが、つい昨日のように思い出されますが、あれから 15 年も経ってしまっています。大会の開催趣旨に、次のように書いていました。「分子・原子のレベルで生体構成成分やそれらの間の相互作用を理解することはスタートラインです。構成分子を量子化学・計算化学のレベルで理解することから、生命の仕組みを理解することを結ぶ道筋と手段は、化学・生物・情報の中にあります。…」

この 15 年の間に、計算機の計算速度も記憶容量も比較にならないくらい大きくなり、大規模データの利用も格段に進歩しました。新型コロナウイルス対策にも、計算機シミュレーションに基づく知見が活用されるようになりました。CBI 学会が対象とする研究分野の重要性は増えています。着実な研究進展が重要です。もうそろそろ、ブレイクスルーが起こるのでは、と期待しています。

# 目次

(1) 巻頭言 「CBI 学会からブレイクスルーを」	
相田美砂子 (広島大学 学長特命補佐 (研究人材育成担当) / 特任教授) .....	1
(2) ホットトピックス「実験における不確定性の考慮により、 分類閾値付近の生物活性予測を向上させる確率的ランダムフォレストの紹介」	
黒田 正孝 (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所) .....	3
(3) CBI 研究機構便り 量子構造生命科学研究所 第二回シンポジウム報告	
上村 みどり (帝人ファーマ株式会社) .....	7
(4) 若手の会コラム第 2 回 シリーズ企画「若手の会キャリア (第 1 回)」	
「私のキャリアパス紹介」～企業からアカデミアへの出戻りキャリア～	
池田 和由 (理化学研究所・慶應義塾大学) .....	13
(5) CBI ジャーナル便り (23) .....	22
(6) 講演会報告・予告 .....	23
(7) 委員会報告 .....	30
(8) 学会事務局からのお知らせ	
2022 年度 CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞 募集案内 .....	34
(9) 編集後記 .....	35

表紙デザイン：CBI 研究機構 量子構造生命科学研究所のロゴ  
 (本学会誌 7 ページにシンポジウム開催報告を掲載)



「AI技術とその応用」分野

実験における不確定性の考慮により、  
分類閾値付近の生物活性予測を向上させる確率的ランダムフォレストの紹介

黒田 正孝

国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所

AI健康・医薬研究センター バイオインフォマティクスプロジェクト

Mervin, L. H., Trapotsi, M., Afzal, A. M., Barrett, I. P., Bender, A., & Engkvist, O. Probabilistic Random Forest improves bioactivity predictions close to the classification threshold by taking into account experimental uncertainty. *Journal of Cheminformatics*, **2021**, *13*:62  
<https://doi.org/10.1186/s13321-021-00539-7>

蛋白質とリガンドの相互作用測定には、実験誤差により再現性の限界がある。このような測定結果を使って作成した予測モデルには、性能に影響を与える誤差を含んでいるが、通常のモデル生成において、このような誤差は無視されている。著者達は、Reis らが発表した確率的ランダムフォレスト(Probabilistic Random Forest, PRF)分類器(Reis I et al., *AJ*. 2019 157:16、<https://github.com/ireis/PRF>)をもとに、この問題に対する新しいアプローチを提案した。

通常のカテゴリ分けは、測定値を閾値に基づいて、0や1などのラベルに付け替える。新しい手法では、このラベルを測定結果から算出される標準偏差を用いて式1の様に再定義する。

$$\Delta y(\vec{c}) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\overrightarrow{P_{Activity}} - P_{Threshold}}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right] \quad 1$$

ここで、 $\Delta y$ は確率的ラベル。 $\vec{c}$ はトレーニングセットの化合物。 $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ 、

$\overrightarrow{P_{Activity}} = -\log_{10} \text{Activity}$  (例えば pIC50)、 $\sigma$ は標準偏差である。二値分類の例として、



決定木で出力される予測計算値は、クラスA、Bの確率となる。

$$Pr_A \rightarrow \sum_{terminalnodes} \pi(n) \times \bar{P}_{n,A} \quad 7$$

$$Pr_B \rightarrow \sum_{terminalnodes} \pi(n) \times \bar{P}_{n,B} \quad 8$$

pChEMBL を用いて評価を実施した。学習モデルとして通常のランダムフォレスト(RF)によるものと、ラベルを図1のように変換したPRFによるものを作成した。予測計算では、それぞれのラベルの確率を出力とした。4つの異なる $\sigma$ に対するそれぞれの結果を図2に示す。

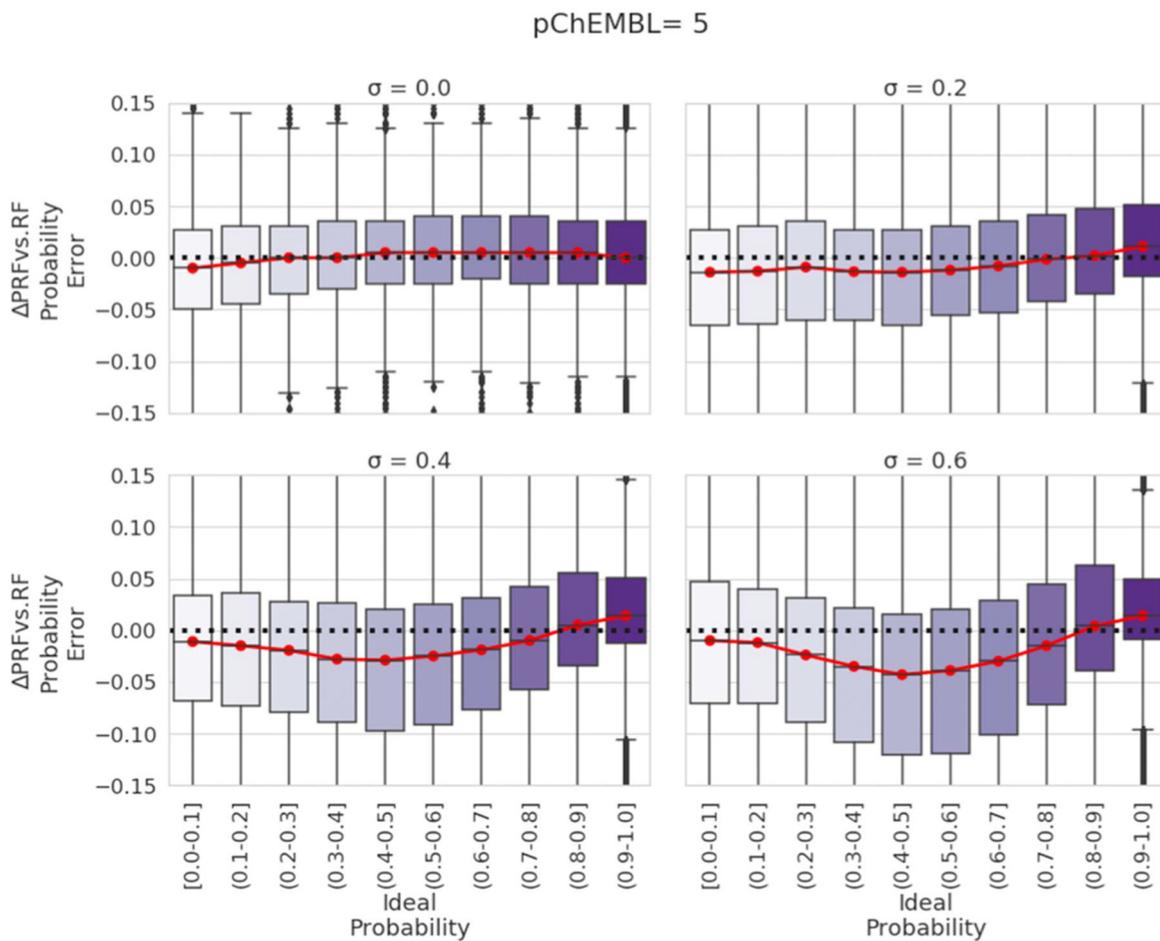


図2. 異なる $\sigma$ における、理想確率に対するPRFとRFのエラーマージン差。赤点がエラーマージン差を示す。

横軸がトレーニング・テストセット両者の $\sigma$ と閾値を考慮した累積分布関数から計算された $y$ の‘理想’確率、縦軸がエラーマージンの差である。

$$Error\ Margin_{PRF} = (ideal\ y\ label - PRF\ probabilities) \quad 9$$

$$\Delta PRF\ vs.\ RF\ probability\ Error = Error\ Margin_{PRF} - Error\ Margin_{RF} \quad 10$$

$\sigma = 0.0$ の場合、PRFとRFの性能はほぼ同じであるが、0.2以上ではPRFの性能がRFを上回っている。また、PRFのエラーマージンは、RFに対して理想確率(x軸)の中央に向かって最も良い成果を示している。さらに、モデルの不確かさの違いを出力値と理想確率の差を使って検討した結果、データに不確実性がある場合、RFに比べてPRFが有利であることを示した。つまり、PRFはChEMBLにおける実験の種類や測定データの集合的な変動を捉えていると言える。これに対し、RFは、性能が低く *overfitting* や *overconfidence* の傾向を表していた。

したがって、PRFは、学習データにノイズがあるという先験的知識がある場合に、RFの代替アルゴリズムとして検討すべきものであると著者たちは提案している。

# CBI 研究機構便り

## 量子構造生命科学研究所 第二回シンポジウム報告

CBI 研究機構 量子構造生物学研究所 所長

上村みどり（帝人ファーマ株式会社）

### 「生体分子の動的挙動解析への挑戦 試料調製から解析まで」

- ◆開催日：2021 年 10 月 29 日（金）9:00 ～ 12:00
- ◆オンライン開催（Zoom ミーティング）
- ◆参加費：無料

#### ◆プログラム

1. 「クライオ電子顕微鏡を活用した構造創薬」  
藤吉 好則（CeSPIA / 東京医科歯科大学）
2. 「クライオ電子顕微鏡法 ～ 高難度タンパク質構造解析への挑戦 ～」  
葦原 雅道（Thermo Fisher JAPAN）
3. 「中性子利用で広がる量子構造生命科学の世界  
～ SAXS、SANS を駆使する試料作製から解析まで ～」  
杉山 正明（京都大学）
4. 「中性子結晶解析でかなうウェットとドライの融合」  
玉田 太郎（量子科学技術研究開発機構）

前回の 2021 年 5 月 14 日のキックオフシンポジウムおよび 2021 年大会での FMODD コンソーシアムと当研究所のフォーカスセッション枠を利用したジョイントシンポジウム（CBI 学会誌第 9 巻 4 号に報告掲載）に続き、今回は、第 2 回目のシンポジウムを「生体分子の動的挙動解析への挑戦 試料調製から解析まで」と題し、中性子産業推進協議の生物・生体材料研究会と共同で開催することにいたしました。前半は、前回のシンポジウムでご講演いただけなかった Cryo-EM を基盤とする企業のご講演、後半は、中性子を用いた溶液と結晶解析を試料調製から動的構造を得るまでをお話しいただきました。いままででない経験したことのないヘテロな組み合わせとなりますが、生体内における分子構造状態を創薬にどうかしていくかについて今後、計算科学を含むさまざまな実験的な基盤技術を融合して解明していく時代に入っているいま、まずはテクニカルワードを含め双方を知ることという認識のもとに本シンポジウムを企画いたしました。

最初のご講演は CeSPIA 社取締役および東京医科歯科大学特別栄誉教授藤吉好則先生にお願いした。構造生物学の Cryo-EM のフィールドでは文字通りレジェンドであり、特に Cryo-EM 自体の開発を通じて、膜タンパク質の構造解析への道を拓いた世界的にも著名な研究者であると同時に、UCSF の Yifan Cheng 教授や、スクリプス研究所の Andrew Ward 教授など、いまをときめく単粒子 Cryo-EM 研究者の方々のメンターとしても知られ世界的な科学者の人材育成にも力を注いでこられた指導者でもおられる。前回のキックオフシンポジウムでは、残念ながらどうしてもご予約があわず、今回念願のご講演をしていただくことができた。

藤吉先生は Cold emission Gun 等 Cryo-EM を利用した創薬を製薬企業と共同で進めるため、2017 年に CeSPIA 社を立ち上げられた。2013 年に Yifan Cheng らが TRPV1 の構造を単粒子解析法で解析して (M. Liao et al. Nature, 504, 107-12 (2013)) 以来、膜タンパク質の構造がこの方法とクライオ電子顕微鏡を用いて非常に短期間に解析されるようになった。CeSPIA 社においても、Gap Junction の研究を進めており、二次元結晶を用いた Cryo-EM で高分解能の解析が困難で、何年もの年月をかけても構造が解析できなかった Innexin の構造を、クライオ電顕を用いた単粒子解析法によりわずか 2 か月で構造解析できた (Nat. Comms., 7, 13681 (2016))。

また膜タンパク質の構造解析がこのように短期間にできるようになると、Cryo-EM により得られた構造をもとにしたドラッグデザイン (Structure-Guided Drug Discovery) が薬剤開発のタイムスケジュールとマッチしうることがわかる。膜のなかでの構造というものがよりの確にとらえることができ、お酒をのむと AQP4 が発現が上昇し、脳浮腫の原因となるといわれているが、構造をみると脂質二重膜がチャネルの中に入り、N 末端を押し下げて、分子凝集に導くなどの、生体反応機構をみることもできる。この様に、生体反応機構を含めた医薬品開発がより合目的に進むようになる可能性を示している。

次のご講演は、当研究所の法人会員でもある Thermo Fisher Scientific 社 japan 葦原雅道博士のご講演である。Thermo Fisher Scientific 社は Krios をはじめとしたハイエンド Cryo-EM の世界のトップメーカーであり、全世界に圧倒的なシェアを持っている。Thermo Fisher Scientific では、クライオ電子顕微鏡法をより多くの研究者の皆様に活用いただくべく、大きく三つのソリューションを提供する。第一に、データ取得、解析の自動化ならびに高度化である。Thermo Scientific™ Krios™ および Glacios™ といった製品提供に留まらず、データマネジメントも考慮に入れた構造解析ソリューションを提供する。また、並行して光学系ならびに検出器の更なる高度化を推進している。第二に、試料調整における技術的サポートの提供である。Thermo Fisher Scientific 内の他事業であるタンパク質生産受託部門と連携を取り、高難度タンパク質の受託生産サービスに取り組んでいる。第三に、構造解析ワークフローにおけるコンサルテーションの提供である。ワークフローにおいて出くわす技術的なハードルや、クライオ電子顕微鏡法全般にわたる

技術的障壁に対して、Thermo Fisher Scientific が有する多くの知見をもとに解決策を図る。状況に応じて、高難度ターゲットに対する共同実験も提案遂行する。非常に印象的なのは、世界中の Cryo-EM を技術を生業としている CRO との協業プログラムである。製薬企業にとって、CRO を利用することは、研究の効率化に避けて通れない戦略のひとつであるが、直接海外との交渉をすることは特に電顕の専門家がない場合、どの CRO が一番適しているかの選定も含め悩ましいところであるが、今回のご提案であると、日本ですでに信用のある Thermo Fisher Scientific Japan がその橋渡しをしてくれるというお話でありとてもすばらしいご提案である。

最後のご講演は、中性子を用いた溶液散乱から、京都大学の杉山先生と、中性子回折のお立場から量子科学技術研究開発機構の玉田様にお話しいただいた。我々の量子構造生命科学研究所は、構造を量子力学あるいは量子化学的立場でみていくのが一つの目的であり、そのために中性子は欠かすことのできない技術であると考えている。ご存知のように日本には、東海村に世界に誇る J-PARC という巨大実験施設がある。いままで、製薬会社はもとよりアカデミアにとっても SPring-8 や KEK といった放射光施設が多用されるのに比較して、なじみのない領域ではなかったろうか？それは、放射光施設もまさにそうであったように、まだ、非常に限定されたアカデミアによる技術開発領域であったという認識である。しかし、Cryo-EM がそうであったように、ひとつのブレークスルーが世の中の地図をがらりと様変わりさせることもあり、今後は、我が国のもつすべての技術を総動員して、生体内での分子の挙動を突き止めそれに応じたメカニズムに基づく創薬ができる未来になるのは確実であり、その可能性をご講演していただいた。

杉山先生からは溶液散乱において、計算機シミュレーションと併用により、X線小角散乱法 (SAXS) においても、溶液中の生体高分子の外形を捉えることが可能となってきている。これは、小角散乱を用いることで動的な揺らぎを多く含む構造多型となる生体高分子の静的・動的構造解析の可能性を意味している。このような新たな解析手法の開拓のためには全体構造の外形情報を与える SAXS のみでは実験データが不足であり、特に大型の複合生体高分子では選択的に各構成要素の構造情報 = 内部構造情報を解析に加えることが求められる。これに応える手法が選択的重水素化を用いた中性子小角散乱法 (CM-SANS 法または iCM-SANS 法) が重要である。従来、障壁となってきたのは、試料の重水素化とその大量発現手法とそのコストである。選択的重水素化を用いた中性子小角散乱法 (CM-SANS 法または iCM-SANS 法) であるが、この技術の汎用化への障壁となってきたのが試料の重水素化とその大量発現手法とそのコストである。この問題に対処するために重水素化法・重水素化率測定法・重水回収法 (再利用) 等をマニュアル化して公表し、誰でも重水素化を行う事に支援したい。更に解析手法を一層発展させるために、ライゲーションを用いたマルチドメイン蛋白質の同位体塗分け技術の開発も進めている。最近、3つのドメインライゲーションに成功しており、これを用いてドメイン毎に異なった重水素

化率を持つヘテロ重水素化マルチドメインタンパク質の作成も可能となってきている。このような特異的重水素化試料を用いた SANS 法、高純度の試料を用いた SAXS 法による溶液データに結晶回折・クライオ電顕による構造データも加え、計算機解析技術を併用して、大規模複合体の構造解析やマルチドメイン蛋白質のダイナミクス解析、さらに細胞を模した高濃度混雑系での構造解析を進めていける。最近 ABC transporter で A のみを可視化したり、水晶体のなかのタンパク質の挙動の可視化に成功している、SAXS、中性子回折は形をみるものに加え、中性子による弾性散乱や非弾性散乱の実験を加えることで生体内での動きを予測できると考えており、これはほかの手法ではできない中性子のだいご味である。また、中性子の特徴として、放射光や、Cryo-EM と異なり、常温で実験できるというのも、動きをみるには適している点であり、メリットであると考えている。

玉田先生よりは、X 線結晶構造解析が果たしてきた役割は大きく、PDB に登録された構造の約 9 割を占める。さらに、スナップショットである X 線結晶構造に基づき、酵素反応を一続きに活写する計算科学によって、構造-機能相関に迫るアプローチの実施例も多い。しかしながら、実験結果と計算結果に齟齬が生じることが、特に金属酵素において、散見される。これに対して、3 つの要因をあげることができる。1 つ目は X 線照射による損傷である。X 線照射により発生した水和電子が金属酵素の反応場である金属中心を迅速に還元し、それに伴う構造変化が誘発されるため、知るべき構造とは異なる構造を得ることになる。2 つ目は、タンパク質マトリックスを構成する原子の約半分を占める水素原子の構造情報が通常の X 線構造解析では得ることが出来ない点である。タンパク質中のプロトン移動が反応の鍵となる場合、その経路は推測の域にとどまる。また、活性に寄与するアミノ酸残基のプロトン化状態についても予測に頼らざるを得ず、量子化学計算において、特に水素の位置で曖昧さを排除できない。3 つ目は金属中心について、化学反応に寄与する分子軌道レベルの情報取得が通常の X 線結晶構造解析では困難なことである。この点では、そもそも量子化学計算と実験構造の整合性を議論の俎上に載せることさえ難しいと言える。そこを埋めるのがまさに中性子回折によるものと考えている。

(参加人数 120 名)



**C B I 研究機構 量子構造生命科学研究所**  
**中性子産業利用推進協議会 生物・生体材料研究会**  
**—合同シンポジウム— 開催のご案内**



「生体分子の動的挙動解析への挑戦 試料調製から解析まで」

主催：C B I 研究機構量子構造生命科学研究所、中性子産業利用推進協議会

(一財) 総合科学研究機構 (CROSS) 中性子科学センター

共催：茨城県中性子利用研究会

協賛：J-PARC MLF 利用者懇談会

1. 開催日時：2022 年 3 月 4 日 (金) 9:00 ~ 12:20
2. 開催方法：ZOOM によるオンライン開催 <接続 URL は申込締切後にお知らせします>
3. 参加費：無料
4. 開催趣旨：前回に引き続き、いま世界的に大きな注目を浴びている Cryo-EM について現在世界のトップを走っている中国のベンチャー企業 2 社と、創薬ターゲットのほとんどの GPCR について、天然型で全長の発現を無細胞系で発現を可能にされた理研の横山先生と、水素原子の実験的な座標の取得は中性子回折が唯一無二の手段とされてきたがクライオ EM の単粒子解析および ED で水素原子まで決定できるという事実を明らかにされてきた SPring-8/ 東北大学の米倉先生をお招きし、お二人に Front Row のお話を伺い、議論を行います。

5. プログラム：(※の 2 講演は英語での講演となります。質疑も英語となります)

◆ 9:00 ~ 9:05 はじめに

上村みどり (量子構造生物研究所長 / 中性子産業利用研究会 生物生体材料研究会主査)

司会：葦原雅道 (Termo Fisher Scientific Japan)

◆ 9:05 ~ 9:50 "Cryo-EM services of Biortus" ※

Dr.Jack Jan (Director of Biortus Cryo-EM unit)

◆ 9:50 ~ 10:35 "Advances and Applications of Cryo-Electron Microscopy: Prospects of Resolution Revolution in Drug Development" ※

Dr.Xiaodan Ni (Senior Scientist, Shuimu Biosciences)

<10:35 ~ 10:45 休憩 >

司会：中川敦史 (大阪大学蛋白質研究所)

◆ 10:45 ~ 11:30 「無細胞系を用いた GPCR 全長発現」

(仮題) 横山茂之 (理研)

◆ 11:30 ~ 12:15 「クライオ EM と ED による高精度解析—水素の可視化とその先へ」

米倉功治 (SPring-8/ 東北大学)

◆ 12:15 ~ 12:20 おわりに 佐藤 衛 (横浜市立大学)

6. 申込方法：以下の申込フォームからお申込み下さい。

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSenUZATsyi0gl331203xkoAGPq28Yf9rN3exVD83daptClGzA/viewform>

※ご入力いただいたメールアドレスにお申込み確認のメールが自動的に送信されます。

返信が確認できない場合、あるいは、上記申込フォームが利用できない場合には、ご所属、お名前、E-mail アドレス を本文に記して、中性子産業利用推進協議会まで E-mail（アドレスは下記）でお申込みください。

7. 参加申込締切：2022 年 2 月 25 日（金）

※本ジャーナル発行時には、締め切りを過ぎておりますが、ご参加ご希望される方は、直接下記連絡先までご連絡ください。

8. アンケートのお願い

次回以降の開催の参考とするため、本研究会終了後にアンケートをお願いしています。ご協力をお願いいたします。

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLScQDppmpBTfWKdPX4-n9u0EjH40Z3GRPAB1LtV6pp-iod7i1Q/viewform>

---

<問合せ先> 中性子産業利用推進協議会（略称：IUSNA）

〒 319-1106 茨城県東海村白方 162-1 いばらき量子ビーム研究センター D201

TEL：029-352-3934 FAX：029-352-3935（火曜日と木曜日のみ勤務）

E-mail: info@j-neutron.com





CBI若手の会コラム(第2回)

シリーズ企画「若手の会キャリア (第1回)」

「私のキャリアパス紹介」

～企業からアカデミアへの出戻りキャリア～

池田 和由 (理化学研究所・慶應義塾大学)

## 1. はじめに

私は現在、バイオインフォマティクス研究者であり、インシリコ創薬に関する研究をしています。大学院生命科学研究科修士課程を卒業後、公的研究機関のポスドクを経て、ベンチャー企業などで勤務し、今は理化学研究所(以下、理研)と大学の両方でアカデミアの研究者として働いています。2005年に博士号を取得してから、プロの研究者としてはもう17年ほどのキャリアになりますね。今回は、有志のメンバーと活動してきた「CBI若手の会」で、キャリアパスに関するコラムの先陣を切ることになりました。

私は、アカデミアと企業を行ったり来たりしているという点で、同世代の研究者の中では割と変わった研究キャリアと思います。「企業からアカデミア」「アカデミアから企業」のような一方向ではなく、両方向の転職と言うのは、大ベテランの研究者、教授クラス以外ではかなり珍しい印象です。

私がどのような考えを持ち、機会を得て、キャリアを変えたのか。本コラムが皆様の今後のキャリアに何か参考になればと思います。ちなみに、どの職場にも3年以上は従事していましたので、決して短期の転職癖があるわけではないことは予めご理解いただければ幸いです。

## 2. これまでの軌跡

---

学位：2005年 博士号（主に分子動力学法（MD）） 東京薬科大学

---

経歴：

2003年～06年 産業総合研究所

2006年～09年 創薬ベンチャー企業（ファルマデザイン社）

2009年～12年 EMBL-EBI(英国)

2012年～16年 国内IT企業（レベルファイブ社）

2016年～ 慶應義塾大学

2020年～ 理化学研究所

---

### 「大学院で分野変更」～思い切ってWetからDryへ～

修士の最初は、環境指標生物の一つであるミジンコの遺伝子解析を行うという、完全にWetな研究室に入りました。2002年頃、「ヒトゲノム解読プロジェクトがもうすぐ完了する」というニュースが話題になり、私も大変刺激を受けたものです。特に興味を持ったのは、「BLAST (Basic Local Alignment Search Tool)」という遺伝子配列検索プログラムが既に開発されており、解読された遺伝子情報を誰もが無料で使用できたことです。ちょうど同じ時期、私の大学にもMD計算を専門とする肥後 順一先生の研究室が新設されたのもあり、私は、当時直属の教授に研究室移動という無茶なお願いをし、修士課程では肥後先生の研究室に移りました。実際、私は実験が下手な学生でしたので、自分には計算のようなDryの方が向いているとの直感があったのかもしれませんが。トライ&エラーを短期間で繰り返し、いくらでもやり直しが効く計算は、自分の性に合っていました。研究分野の転向には思い切りが必要ですが、時代の流れに沿った判断でもあったと思います。

移動先の研究室は開設したばかりだったので、研究環境を一から作るのはとても大変でした。ただ、研究室外へ学びに行く貴重な経験もたくさんあり

ました。その一つ、2001年に新設された「生命情報科学研究センター (CBRC)」(産総研)に出入りするうちに、構造予測を専門とする富井健太郎先生のもと、バイオインフォマティクス研究を本格的に始め、生命情報を解析する面白さを知っていきました。

幸いにも、私の大学院は社会人でも授業の出席義務が厳しくなかったため、産総研にしながら博士号を取得することができました。日本だと働きながら社会人研究者として博士号を取得できる企業もあるので、取れるタイミングで取るのも良いですね。私もそういった制度を活用し、博士課程の途中からはお給料をもらいながら研究した結果、そのままポスドクとして雇ってもらえることになりました。

#### 「ポスドクからベンチャーへ」～創薬の基礎を学ぶ～

産総研で博士号を取得した後は、環境を変えようと思い、インシリコ創薬ベンチャーである株式会社ファルマデザイン (現ペプチドリーム株式会社)に就職しました。ベンチャー企業では、売り上げ目標なども現場研究者が意識しないといけなかったもので、正直、大学よりもシビアですが非常に刺激的でした。論文執筆がゴールではなく、かつ最新技術をフォローしながら一定期間の中で結果を出すことが求められました。また、製薬企業の人との協業も多く、先方の期待にどう応えるかを常に念頭に置いて研究するのは、私にとって大変充実した経験になりました。

研究基盤となる知識や技術は、大学院や産総研で培ったものが役に立ちましたが、アカデミアとは異なるアウトプットを考える必要がありました。例えば、予測モデルを開発する場合、論文化するには高い予測精度が良いとされますが、創薬の現場では化合物の新規性がなければ、予測精度が良いモデルも役に立たないと判断されることがあります。

そして、人間関係については、私はベンチャー企業の気質が合っていたように感じます。上下関係が徹底されていなかったのも、大先輩研究者と新卒

同然の私が一緒に営業先へ行き、元大手製薬企業の管理職だった方に直接レクチャーしてもらおう機会などを自然と頂きました。また、研究成果がシビアに求められる一方、フレキシブルな働き方ができたのも良かったですね。

### 「海外での研究生活」～会社をやめて単身EBIへ～

私は、子供の頃から漠然と海外に憧れていたもので、一度は日本以外で仕事をしてみたいと思っていました。ただ、英語が得意なタイプではなく、社会人になってから英会話学校に通うなど、趣味の延長線上で学び続けていました。

ある時、後にChEMBLデータベースの前身を開発したInpharmatica社のJohn Overington氏が「欧州バイオインフォマティクス研究所(EMBL-EBI)」で新しく研究室を立ち上げると言う噂を耳にしました。知人を通じて彼にメールを送ったところ、「興味があったら応募してみなさい」という返事が来ました。公式の求人リンクを確認すると、応募資格者はEU在住者のみ（当時イギリスはまだEU加盟国でした）で、私は対象外のようでした。そこで焦ることなく、まあ何とかなるだろうと思いながら応募した結果、採用されることになりました。現地面接の際は、週末を利用して往復2、3日の弾丸日程で行きました。海外での挑戦は、いい意味で常識に囚われず思い切って行動するのも良いのかもしれない。

後から分かったことですが、この手の人材は世界的にも不足しており、EU圏内だけで見つからない場合は広く求人をかけるという特別ルールがあったようです。サイエンスの故郷でもあるイギリスで研究の仕事を得られたのは、うまく滑り込んだと言うしかない幸運でした。

EBIの研究生活は、私にとってまさに理想的でした。GSKやファイザーUKなど製薬企業に勤めていた研究者が同僚にいて、国籍だけでなくキャリアも多様な人と仕事ことができました。また、EBIは研究だけでなくデータベースやツールなどのサービス提供も重要なミッションだったので、研究所には研究者だけでなくITエンジニアやキュレーターなど各分野のスペシャリストが揃

っていました。彼らは職種ごとに業務が分担されており、お互いリスペクトし合う文化があったのが非常に良かったです。

今はオンラインツールが発達し、海外とも簡単にやり取りできますが、実際に現地で仕事をするのは、オンラインだけでは得られないものもあると思います。私は、社会人になってから日本の企業を辞めて海外のファンドで採用されたので、新卒採用のような特別扱いはなく、目まぐるしい日々を手一杯でした。日本の企業で海外留学制度がある場合には、留学先にとってお客さん感があるかもしれません。いずれにしても、海外の環境が整ったところで研究できるのは良い経験だと思います。

### 「アカデミアへの出戻り」

そして、イギリスから帰国後は日本のIT企業（レベルファイブ社）に4年ほど勤めた後、大学の研究室に移ることになりました。きっかけは、お世話になっていた関係者からアカデミアで創薬関連の研究プロジェクトがスタートする話を受けたこと。様々な経験を積んだ自分だからこそできることがあるのではと思い、再転職を決意しました。

アカデミアは、自分の仕事そのまま自分の業績になる点がやりがいだと感じます。企業の場合、社内で良い研究成果が出たとしても、自社の都合だけで物事が進まないことがあります。実際、私がベンチャー企業にいた時には、受託先の都合により研究を途中で止めるなどの判断がありました。一方、アカデミアでは、外部資金の研究プロジェクトの場合は、それなりにプレッシャーはありますが、研究成果は公開する前提があり、対外的に発表する場があります。大学や理研などでも産学連携のプロジェクトが増えるにつれて、様々なキャリアの研究者とチーム一丸となって何かを成し遂げる喜びを感じています。

そして、アカデミアと企業を行ったり来たりして気付いたのは、どんな立場でも人間関係を大切にしておいたほうが良いということです。サイエンス

の業界は案外狭いので、例えば、自分が顧客として接していた人が逆の立場になることもあります。私自身を振り返ってみると、辞めた後にも組織や企業の人とそれなりに良い関係を築いてきたと思います。「飛ぶ鳥跡を濁さず」という言葉もありますが、なるべく周囲に迷惑をかけず円満に退くのは、後々のキャリアにとっても重要だと感じました。

### 3. 生き抜くためのスキル

#### 「自分の武器を理解して磨く」

日本のIT企業にいた頃、人事採用を担当したことがありました。その時、就職活動では「自分の強みを理解していること」と、特に私のように転職歴がある場合は「自分のキャリアをストーリーとしてちゃんと説明できること」が重要だと感じました。私はもともと明確なキャリアイメージを持っていなかったのですが、自分の強みは何か？を意識して仕事していました。

例えば、計算分野へ転向した時期は早くはなかったのですが、当時はバイオと計算の両方に精通した研究は多くなかったので、そこを意識して研究を進めました。また、産学連携の研究プロジェクトでは、アカデミアと企業を橋渡しする人材が求められるため、私のような多様なキャリアは存分に活かせると思います。

余談ですが、海外の就職面接でも同じように自分の強みを説明できなければなりません。むしろ自分のアピールポイントを積極的に売り込む必要があるので、常に自分自身を言葉で伝えられるよう磨き上げていくことが大切だと思います。

#### 「企業経験は活かせる」

ポストク時代に一度、就職活動した時のこと。ある企業からは社会人経験がないと採用できないと断られました。世間一般にいうと、ポストクは社会人経験がなく、企業での就業経験がない人は扱いづらいという認識があったのだと思います。そういった意味で、いわゆる一般企業に入ればそれなりの

ビジネススキルが身につく点はプラスになると思います。今はアカデミアでも報告書を書いたり、プロジェクトを管理したりする能力が求められるので、一般企業で学ぶスキルが役に立つことも多いです。

中でも重要だと感じるのは「時間の感覚」です。アカデミアは1年、大企業は2～3ヶ月、ベンチャー企業だったら1週間もあれば環境が変わっていきます。ライフサイクルが早い場所で若い頃に経験を積むのは、30代、40代以降のキャリアを考えるうえでも重要な経験になると思います。これからずっとアカデミアでキャリアを積もうと決めた学生や若手研究者も、一度は就職活動を経験してみても良いですね。私は修士やポスドクの時、企業の就職説明会などに行ったことがあります。そういった場で経済の流れや社会のニーズを知り、研究者としての客観的な価値みたいなものを把握する機会を得ました。

#### 「やりがいや収入から見た企業や大学の特徴」

収入は年齢や働く場所によって変わるため一概に言えないですが、企業だと一般的に福利厚生が良く、年齢とともに収入が上がったり責任ある仕事を与えられたりするなど、満足度は高くなっていく傾向にあると思います。特にIT企業などは若くても収入が良く、ベンチャー企業では最初の設定が重要でその後は交渉次第なところもあります。比較的規模の小さい企業は、収入は高くないかもしれませんが、一人で様々な業務を経験できる点は魅力的だと思います。一方、給料は年齢相当になると思いますが、教育に興味があれば大学、より研究色が強い場所であれば公的研究機関がいいと思います。ちなみに、海外は職種によって収入が決まるので、自分の収入を上げるためには転職するしかない印象を受けました。

#### 4. 若手研究者に伝えたいこと

以上のように、私のキャリアパスは日本と海外、アカデミアと企業と多様な環境で作られています。ただ、修士の頃から共通しているのは、自分の研究が社会にどう役立つか、常にアンテナを張りながら研究することです。

大学院時代には、理系の大学院生がビジネスについて自主的に勉強する集まりに参加し、東工大や東大など他大学の学生と一緒に活動することもありました。こうした行動があったからこそ、大学の垣根を越える人脈が広がり、それが今でも続いています。大学の研究室だけだと、どうしてもタコつぼ的な環境に陥ってしまい、人間関係も狭くなりがちです。現代ではネットやSNSもありますが、それでも自分から生の情報を取りに行く姿勢は時代を問わず必要になると思います。

自分で行動し続けることは、いつ訪れるか分からない縁を掴み取ることに繋がります。私の場合、海外での就職やアカデミアに戻るきっかけは、いずれも突然の出来事でした。どんな機会も、自分にとって一番良いタイミングで訪れるとは限りません。私の転職では、結果的にどちらも自分から応募したわけですが、どんな場合にも入念な準備は欠かせません。いつ何時も柔軟に動けるようシミュレーションしておく、突如やって来る機会を掴む度胸が湧き出てくることでしょう。

一方、私のキャリアで反省するとすれば、日本へ戻ることをあまり考えずに海外へ渡ってしまったこと。家族の事情で帰国したのですが、タイミングとしては若干失敗だったと感じています。海外に行くならもっと若いときに行くのがお勧めで、さらに計画的な人は、日本に戻る時の何かしらの当てを作ってから行くのが賢明な判断だと思います。

最後に、大学研究室や企業を選ぶ際、組織の規模や研究施設が充実しているからと言って、すぐに研究成果が出る環境であるとは限りません。研究のスピードや中身、働く環境など、どのバロメーターを重視するかによって、研究への取り組み方も変わるでしょう。いろいろな環境を経験した私としては、一から自分の力でやり遂げなければならないような環境に身を置くと、研究のバイタリティや他分野の人とのコミュニケーションなど豊富な経験が得られると思います。若ければ若いほど良いというわけではないですが、早め早めに行動してみる姿勢を心掛けてみてもいいかもしれません。

## CBI若手の会コラム担当通信

CBI若手の会コラムのシリーズ企画として「若手の会キャリア」がスタートしました！昨年実施したCBI若手の会会員を対象としたアンケートでは、アカデミア・企業研究者の違いや特徴を知りたい、実際にどのようなキャリアパスがあるのか、などキャリアに関する興味が多く寄せられ、研究者としてのキャリアパスに大きな関心があることが伺えました。

今回は「CBIキャリア」の記念すべき第1回目として、理研の池田和由先生に「私のキャリアパス～企業からアカデミアへの出戻りキャリア～」のタイトルで寄稿して頂きました。アカデミアと企業両方のキャリアをお持ちになる先生の視点やご経験は、これからどのような研究者生活を送るか悩んでいる若手研究者のみなさまにとっては大いに参考になるのではないのでしょうか？

読者の皆さまにおかれましては、是非新しい企画や感想などお寄せ下さい。また、一緒に企画して下さる仲間も募集中です。

URL: <https://wakate.cbi-society.info/wakate/contact/>  
これからも読者のみなさまのご協力頂きながら、楽しく役に立つ企画を目指して参ります。



次号は2022年6月発行の第2号にて「CBIキャリア第2回」を掲載予定です。

### 若手の会コラム担当

熊澤 啓子 (帝人ファーマ株式会社)  
渡邊 博文 (株式会社ウィズメーティス)  
高橋 一敏 (味の株式会社)  
渡邊 怜子 (医薬基盤健康栄養研究所)  
朴 鐘旭 (医薬基盤健康栄養研究所)

## 著者が紹介する CBIJ 掲載論文

## ◆ Original

## Progressing adaptation of SARS-CoV-2 to humans

まったく新しい、より強い株が突然どこからか来る

小西 智一  
秋田県立大学

私は何かの専門家ではなくて、いただいたデータを分析するのが主な仕事です。でも COVID-19 が流行しはじめたとき、専門家の方々が分類のために系統樹を使っているのをみて、ああこれは破綻するな、ちゃんと分析してあげないとみんな困るだろうなと思いました。こんな複雑なデータを、系統樹なんて旧い方法論で扱えるわけありません。そこで、公開データをつかって計算してみました。だからこれは一種のボランティアの結果です。コロナウイルスがどう分類されるべきものか、他に危険なものはないか [1]、最初期にどう変異したか [2]、につづいて、国境をかためたあとでどう変異したのか、その選択圧は何だろうかについて書いたのが本論文になります。これはさらに、ワクチンに対応してどう変異したか、弱毒ウイルスワクチンをつかえないか、をまとめた論文へとつながります [3]。

[1] doi: [org/10.1371/journal.pone.0242954](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0242954).

[2] doi: <https://peerj.com/manuscripts/63964/>.

[3] doi: [10.1101/2022.01.30.22270133](https://doi.org/10.1101/2022.01.30.22270133).

紹介：小西 智一（秋田県立大学）

2022 年 1 月 31 日公開

<https://doi.org/10.1273/cbij.22.1>

# 講演会 報告・予告

## 第 427 回 CBI 学会 講演会

### 「ゲノム編集が変革する創薬～基礎から臨床応用まで～」

日時：2021 年 11 月 19 日（金）13：30 – 17：35

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：石川 誠（日産化学工業 株式会社）、中村 信二（武田薬品工業株式会社）、熊澤 啓子（帝人ファーマ株式会社）、  
緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）、島田 裕三（富士通株式会社）

プログラム：

- (1) 13:30 - 13:35 はじめに
- (2) 13:35 - 14:30 「ゲノム編集技術概論と新規国産ゲノム編集技術について」  
真下 知士（東京大学医科学研究所）
- (3) 14:30 - 15:15 「タンパク質の細胞内導入によるゲノム編集」  
加藤 義雄（産業技術総合研究所）
- (4) 15:25 - 16:10 「遺伝子治療の最新動向とゲノム編集技術の応用」  
小澤 敬也（自治医科大学）
- (5) 16:10 - 16:55 「ゲノム編集の最前線とモダリスの拓く遺伝子制御治療」  
森田 晴彦（株式会社モダリス）
- (6) 17:05 - 17:30 パネルディスカッション
- (7) 17:30 - 17:35 おわりに

開催報告：

今回の講演会では、国内外で著しく開発が進むゲノム編集技術の最前線と未来の治療法につながる展開を学ぶ機会として、ゲノム編集技術の基礎研究から臨床応用までを産官学それぞれでご活躍の 4 名の先生方にご講演いただきました。

真下知士先生から、まずゲノム編集の技術概要や歴史、近年の産業応用の状況について概要をご説明いただいた。そのうえで、先生が開発された日本初の新規ゲノム編集ツール CRISPR-Cas3 と CRISPR-Cas3 を使った新型コロナウイルスの迅速診断法 CONAN について、CRISPR-Cas9 等の手法との比較も交えてご紹介いただいた。

加藤義雄先生から、ゲノム編集やデリバリー技術の前提となる知識や議論のポイントを明示いただいたうえで、各手法の特徴と課題、先生が開発された動物細胞、植物細胞それぞれのデリバリー技術及びゲノム編集の高度化に向けた関連技術や第一世代のゲノム編集技術である ZFN 設計技術について詳細にご紹介いただいた。

小澤敬也先生から、遺伝子治療の概要をご説明いただいた後、造血幹細胞遺伝子治療、AAV ベクター遺伝子治療、CAR-T 細胞治療、それぞれについて薬剤の開発状況や臨床における治療動向や課題についてご紹介いただいた。また、臨床の観点から、今後の検討課題として、CAR-T の長期的な効果、治療の位置づけ等について言及いただいた。

森田晴彦先生から、遺伝子治療やゲノム編集の歴史から産業応用の状況と関連する世界的動向についてご紹介いただいた。特に特許に関する状況については経緯も含め詳細にご説明いただいた。先生が代表を務める MODALIS 社のエピゲノム編集技術と Pipeline、具体的な応用例についてもご紹介いただいた。



真下知士先生



加藤義雄先生



小澤敬也先生

最後に真下先生にファシリテーターをお願いし、パネルディスカッションを実施した。先生方から、技術的な観点や臨床におけるターゲット疾患、特許の考え方や差別化の方向性等幅広い話題についてコメントいただいた。

今回の講演会では、事前に講演会に対する期待やパネルディスカッションでとりあげてほしい話題等について、参加登録者の方にアンケートにご協力いただき、先生方にご対応いただいた。

当日は 120 名以上の方にオンラインでご参加いただき、いずれのご講演においても活発な質疑応答が行われ大盛況となった。ご講演いただいた先生方、アンケートにご協力いただいた方々、ご支援いただいた関係者の皆様にこの場を借りて深く御礼申し上げます。

(世話人一同)

## 第 428 回 CBI 学会 講演会

### 「スペシャルポピュレーションにおける薬物動態の予測」

日時：2021 年 12 月 23 日 (木) 13:00 - 17:50

場所：オンライン配信 (Zoom ウェビナー利用)

世話人：杉山 雄一 (城西国際大学薬学部)、加藤 将夫 (金沢大学薬学系)

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:10 はじめに  
杉山 雄一 (城西国際大学薬学部)
- (2) 13:10 - 13:55 「肝障害時における薬物体内動態変動を PBPK モデルにより予測する」  
杉山 雄一 (城西国際大学薬学部)
- (3) 13:55 - 14:40 「腎障害時における肝消失型薬物の体内動態変化と予測」  
加藤 将夫 (金沢大学薬学系)
- (4) 14:40 - 15:25 「肝取り込みトランスポーター OATP1Bs の遺伝子多型、  
薬物間相互作用および民族差による機能変動の定量的解析」  
富田 純子 (大日本住友製薬株式会社)
- (5) 15:40 - 16:25 「病態時における薬物の消化管吸収の変動が疑われる事例」  
前田 和哉 (北里大学薬学部)
- (6) 16:25 - 17:10 「2 型糖尿病患者における SGLT2 阻害薬の多面的効果に関する基礎的、臨床的評価」  
柴田 敏之 (京都薬科大学薬物動態学分野)
- (7) 17:10 - 17:50 総合討論

開催報告：

市販後の医薬品は、臨床現場においてさまざまな背景を持つ患者に用いられるため、いわゆるスペシャルポピュレーションにおける薬物動態は、実臨床での薬の作用を理解する上で重要である。特に近年、肝・腎障害患者における体内動態試験の報告例は格段に増えている。このため本講演会では、できる限り最新の知見を整理し、その中で導き出される結論や注意点などを抽出し、紹介することを目指して開催された。

杉山雄一先生からは、肝機能障害患者における薬物動態評価において Child-Pugh スコアを用いた患者の層別化が一般的であるが、肝代謝・排泄能力を反映するには限界があること、薬物代謝酵素やトランスポーターの各臓器での発現量や活性、血清薬物結合タンパク質の変化などを組み込んだ PBPK モデルに基づく予測精度が向上しつつあることが紹介された。また予測に影響する血管シャントや intact/sick hepatocyte theory の解説があった。

加藤将夫からは、腎障害患者ではクリアチンクリアランスを用いた層別化が一般的であること、腎消失型だけでなく肝消失型薬物の体内動態が変化し、肝取り込みトランスポーター OATP1B の基質薬の多くが腎障害患者で血中消失の遅延を示す一方、OATP1B の生体内基質では変化が見られず、他のメカニズムの関与もありえること、PBPK モデルによる予測精度向上などが紹介された。

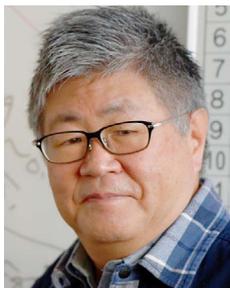
富田純子先生からは、OATP1B1 基質薬ロスバスタチンの体内動態民族差について、OATP1B1 遺伝子多型の民族差とそれ以外の要因についての定量的な評価や、OATP1Bs が関与する薬物間相互作用と遺伝子多型による基質薬 AUC の増加率を、能動輸送と受動輸送の振り分けに関する研究グループ間のばらつきを考慮することで、in vitro 試験から定量的に予測する事例が紹介された。

前田和哉先生からは、肝・腎障害患者における薬物の消化管吸収の変動が疑われる事例が紹介された。ヒトでは経口投与後の体内動態変化が消化管かその以降のどちらの変化に起因するかが区別されていない点が指摘され、腎障害モデル動物における消化管排出トランスポーター P-糖タンパク質 (P-gp) の減少と BCRP の増加、腎障害患者での P-gp 基質薬の血中濃度増加などが紹介された。

柴田敏之先生からは、抗糖尿病薬 SGLT2 阻害剤の慢性心不全、慢性腎臓病への効能・効果追加承認に関連し、どういった糖尿病患者でどのような効果が期待できるかを解明することが重要とお話があり、現在進行中の臨床研究における貴重なデータと PPK-PD 解析から、血糖値以外のトリグリセリドや尿酸値の変化についての最新の知見が紹介された。

年末の忙しい時期にもかかわらず、120 名余のご参加をいただいた。演者ならびにご参加いただいた皆様、事務局の皆様にご感謝申し上げますとともに、この分野のさらなる発展を祈念する。

(金沢大学薬学系 分子薬物治療学研究室 加藤将夫)



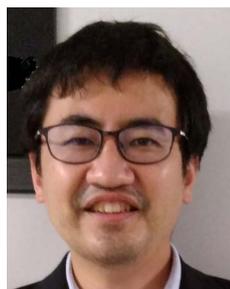
杉山雄一先生



加藤将夫先生



富田純子先生



前田和哉先生



柴田敏之先生

## 第 429 回 CBI 学会 講演会

### 「医療用画像診断の最前線」

日時：2022 年 1 月 13 日（木）13:00 - 17:35

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー利用）

世話人：高橋 一敏（味の素株式会社）、奥田 歩（興和株式会社）、長谷川 清（中外製薬株式会社）、佐藤 太郎（杏林製薬株式会社）

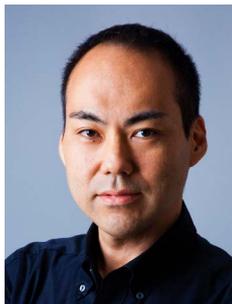
プログラム：

- (1) 13:00 - 13:10 開会の挨拶
- (2) 13:10 - 13:55 「医療・ヘルスケア画像 AI の最新動向 - 診断支援から創薬への展開まで」  
山田 泰永（NVIDIA Japan）
- (3) 13:55 - 14:40 「3 次元 AI を用いた画像情報処理による医療支援」  
諸岡 健一（岡山大学大学院自然科学研究科）
- (4) 15:00 - 15:45 「医療における AI の現状と未来」  
植田 琢也（東北大学大学院 医学系研究科）
- (5) 15:45 - 16:30 「呼吸器疾患の診断における AI 活用の現状と課題」  
木戸 尚治（大阪大学大学院 医学系研究科）
- (6) 16:30 - 17:30 パネルディスカッション
- (7) 17:30 - 17:35 終了の挨拶

開催報告：

NVIDIA Japan の山田泰永先生からは、「ヘルスケア画像 AI」全般についてご講演を頂きました。まず、医療画像 AI の現状とディープラーニング AI の基礎的な仕組みから説明していただき、その後、各種診断支援系 AI アプリケーションの基本から研究開発フレームワークまでを「MONAI」等の実例を用いて解説されました。また、放射線画像のみならず、内視鏡画像や手術画像、更には動画に至るまで最近のトレンドを紹介して頂きました。創薬現場においては、細胞画像や実験動物の行動の解析等へ AI が活用されていることについて取り上げられました。

岡山大学の諸岡健一先生からは、「3 次元 AI を用いた画像情報処理による医療支援」についてご講演を頂きました。まず、CT 画像から深層学習で、上咽頭がん（NPC）の予測のお話がありました。NPC 自身が近接部位により見えにくいために、NPC 以外の部位を除去した後、残った画像であらためてがんの予測というカスケードアプローチを採用されました。さらに、CREST プロジェクトで進行中の子宮頸部の細胞から正常・前がん・がんを含む 5 クラスの分類予測のお話がありました。3D 量み込み法により、細胞の 3 次元形状を正確に把握できたという結果でした。



山田泰永先生



諸岡健一先生



植田琢也先生



木戸尚治先生

植田琢也先生からは「医療における AI の現状と未来」というタイトルでご講演を頂きました。近年は重点が AI 研究から医療現場にシフトしている点についてご説明頂きました。そのための取組として、臨床現場に根付いた AI 研究を行うための東北大学病院 AI Lab についてご紹介頂きました。また、デザイン思考に基づき、医療においてどのようなニーズを AI に託せば効率的に人間をサポートしてくれるかという臨床学的視点からご講演頂きました。

大阪大学の木戸尚治先生からは医学的・科学的視点の両面から、「呼吸器疾患の診断における AI 活用の現状と課題」というタイトルでご講演を頂きました。びまん性疾患、肺結節、COVID-19 などの検出に関する研究成果を踏まえつつ、近年の深層学習などにより研究開発期間が短期間化してきたことをご説明頂きました。その一方で、臨床運用にはパフォーマンスに一貫性を持たせることや、AI の推論過程をホワイトボックス化することが重要であることをご説明頂きました。

(世話人一同)

## 第 430 回 CBI 学会 講演会

### 「日本の創薬を支える技術プラットフォームと計算化学コンソーシアム－現状と未来－」

日時：2022 年 1 月 21 日（金）13:00 - 17:05

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー利用）

世話人：木下 誉富（大阪府立大学）、田中 成典（神戸大学）、志水 隆一（都市活力研究所）

主催：CBI 学会関西部会

共催：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:05 世話人あいさつ  
木下 誉富（大阪府立大学）
- (2) 13:05 - 13:40 「AMED-BINDS 5 年間の取り組みの成果と今後の展望」  
善光 龍哉（AMED）
- (3) 13:45 - 14:30 「蛋白質工学を促進するクライオ電顕ツールの開発と計算機科学との連携」  
井上 豪（大阪大学大学院薬学研究科）
- (4) 14:35 - 15:20 「BINDS インシリコユニットでの計算創薬研究」  
池口 満徳（横浜市立大学大学院生命医科学研究科）
- (5) 15:25 - 16:10 「スパコンを用いたタンパク質 - 医薬品結合親和性・結合解離パスウェイの高精度予測」  
荒木 望嗣（京都大学大学院医学研究科）
- (6) 16:15 - 17:00 「FMO 創薬コンソーシアムが目指す次世代計算創薬」  
福澤 薫（星薬科大学）
- (7) 17:00 - 17:05 世話人あいさつ  
田中 成典（神戸大学）

## 開催報告：

本講演では我が国の創薬研究を支える技術プラットフォーム、計算科学コンソーシアムの最新成果と将来像について 5 名の先生方をお招きしてご講演いただきました。

日本医療研究開発機構 (AMED)・善光龍哉先生から、平成 29 年度から始まった AMED の創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業 (BINDS) の全体像と成果について紹介されました。さらに令和 4 年度から規模を拡大して始まる次期事業の概要が示されました。我が国の創薬研究に手厚い支援が引き続き期待されます。大阪大学・井上豪先生は AMED/BINDS の実績として、グラフェンを化学修飾したクライオ電顕用基材の開発について紹介されました。この技術によりクライオ電顕を利用した構造解析のスピードアップ化及び高精度化が実現されています。BINDS の次期事業において広く使用できるように準備されており、我が国のクライオ電顕解析が一般化されていくと期待されます。横浜市立大学・池口満徳先生は、AMED/BINDS のインシリコユニットの成果について示されました。分子動力学 (MD) シミュレーションを組み合わせたインシリコスクリーニングに今後の応用が期待されます。京都大学・荒木望嗣先生は、KBDD コンソーシアムの成果を示されました。分子動力学シミュレーションを基盤として、タンパク質-化合物結合解離速度 (Kon/Koff) を精密に計算する方法を「富岳」に実装して予測精度の向上を検証されています。星薬科大学・福澤薫先生は、FMO 創薬コンソーシアム (FMODD) の成果と将来像について示されました。COVID-19 関連タンパク質などについて FMO 計算結果を集めたデータベースを構築されています。また、「京」より 100 倍計算能力が高い「富岳」を利用した FMO と MD を組み合わせた動的拡張手法の開発など新たな展開を紹介されました。

今回の講演会はコロナの影響でオンライン開催となりましたが、リモートで約 200 名もの方にご参加いただきました。オンライン配信を快くお引き受けくださった講師の先生方、開催準備をサポート頂いた CBI 学会関係者の皆さま、そして本講演会にご参加いただいた皆さまに、この場をお借りまして世話人一同深く感謝申し上げます。

(世話人一同)



善光龍哉先生



井上豪先生



池口満徳先生



福澤薫先生



荒木望嗣先生



## 今後の講演会 予定

詳細や申込み方法は CBI 学会ホームページ：講演会のページをご参照ください

[https://cbi-society.org/home/meeting\\_seminar.html](https://cbi-society.org/home/meeting_seminar.html)

### 第 432 回 CBI 学会講演会

#### 「結合自由エネルギー計算は創薬研究戦略を変えるか」

日程：2022 年 3 月 17 日（木）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：大槻 幸恵（大鵬薬品工業株式会社）、黒野 昌邦（小野薬品工業株式会社）、近田 千春（オープンアイ・ジャパン株式会社）、佐藤 秀行（シュレーディングー株式会社）

### 第 433 回 CBI 学会講演会

#### 「生命科学の理解を飛躍させるデジタルな研究環境革新」

日程：2022 年 5 月 13 日（金）13:00 – 17:20

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：森 義治（神戸大学）、田中 成典（神戸大学）

主催：CBI 学会関西支部

共催：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

### 第 434 回 CBI 学会講演会

#### 「タンパク質立体構造予測の最前線

#### ～ AlphaFold2 は創薬に真のブレークスルーをもたらすのか～」

日程：2022 年 5 月 26 日（木）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：天野 靖士（アステラス製薬株式会社）、遠藤 真弓（大正製薬株式会社）、嶋田 朋嘉（第一三共株式会社）、谷村 直樹（みずほリサーチ & テクノロジー株式会社）



# 委員会報告

## 創薬研究会運営委員会

---

### 第 50 回創薬研究会運営委員会

日時：2021 年 11 月 29 日 (金) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題と討議事項

- (1) 窓口担当者の交代
- (2) 今後の創薬研究会講演会開催予定について
- (3) 事務局よりスケジュール管理の提案
- (4) 新グループ構成について
- (5) グループ討議 (ブレイクアウトルーム)

### 第 51 回創薬研究会運営委員会

日時：2022 年 1 月 18 日 (火) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題と討議事項

- (1) 新たな委員会運営体制について
- (2) 今後の創薬研究会講演会開催予定について
- (3) グループ討議 (ブレイクアウトルーム)

## 関西部会運営委員会

---

日時：2021 年 12 月 16 日 (木) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 次回の講演会の開催について

- (2) 2022 年 5 月講演会について
- (3) 2022 年 8-9 月講演会について
- (4) 今後の講演会テーマについて
- (5) 次回運営委員会の予定

## 執行部会

---

### 第 75 回執行部会

日時：2021 年 11 月 25 日 (木) 18:00-19:10

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2021 年大会の報告、2022 年大会準備進捗状況報告

- (2) 会計、事務局担当：2021 年度大会の収支見通し
- (3) 渉外担当：協賛等の報告
- (4) 学会誌担当：第 9 巻 4 号 (12/15 発行予定) 発行を準備
- (5) 出版事業担当：リーフレットを CBI 出版から出版する予定
- (6) 編集担当：編集委員会議事報告
- (7) 新規事業担当：研究者の人材バンク (職業紹介業) の検討
- (8) 地域担当：関西西部会 2022 年の講演会開催予定
- (9) 若手の会：ポスター賞受賞者講演の企画について
- (10) 研究推進委員会：2021 年大会 FS セッション開催の報告
- (11) 創薬研究会：講演会の今後の方向性について
- (12) CBI 研究機構：量子構造生命科学研究所 CYP 研究会の設立について
- (13) 事務局担当理事：研究会活動費の支払いについて

## 第 76 回執行部会

日時：2021 年 12 月 16 日 (木) 18:00-19:10

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2022 年大会 第 1 回実行委員会報告
- (2) 会計、事務局担当：2021 年大会決算報告
- (3) 渉外担当：協賛等の報告
- (4) 学会誌担当：第 9 巻 4 号 (12/15 発行予定) 発刊報告、今後の号の掲載内容について
- (5) 出版事業担当：リーフレット出版を準備中
- (6) 編集担当：特になし
- (7) 新規事業担当：今後の講演会企画について
- (8) 地域担当：関西西部会 2022 年開催予定
- (9) 若手の会：特になし
- (10) 研究推進委員会：個別化医療研究会の講演会開催予定
- (11) 創薬研究会：委員交代について
- (12) CBI 研究機構：研究会法人会員年会費について、今後のシンポジウム開催予定について
- (13) 事務局担当理事：特になし

## 第 77 回執行部会

日時：2022 年 1 月 20 日 (木) 18:00-19:10

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2022 年大会参加費について、広報について、今後の実行委員会開催について
- (2) 会計、事務局担当：会計年度 (期間) 変更について
- (3) 渉外担当：特になし
- (4) 学会誌担当：大会報告依頼対象について (シンポジウム、スポンサーセッションなど)
- (5) 出版事業担当：リーフレット出版を準備中
- (6) 編集担当：公開準備中の論文について、分野長会議について
- (7) 若手の会：若手講演会の企画準備について
- (8) 創薬研究会：運営委員会議事報告、ソーシャルメディアについて
- (9) CBI 研究機構：研究会法人会員申し込み状況報告、シンポジウム開催予定
- (10) 事務局担当理事：CBI 学会賞の経緯報告、今後の学会賞決定までのスケジュールについて

## CBI ジャーナル編集委員会

---

日時：2021 年 11 月 12 日 (金) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 報告事項

- 1) 2021 年度投稿論文状況
  - 2) CBI ジャーナルの新分野 2021 年 4 月 1 日追加
  - 3) CBI ジャーナルの新投稿カテゴリ 2021 年 4 月 1 日追加
  - 4) 新体制について
  - 5) 論文掲載料について、論文審査料について
- (2) 討議事項・提案事項
- 1) 論文審査料の変更による影響について
  - 2) 投稿論文を増やすために
  - 3) 他の学会、コンソーシアムとの連携について

## CBI 研究機構

---

### 第 9 回運営会議

日時：2021 年 11 月 17 日 (水) 10:00-11:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 研究所の進捗報告
  - ①量子構造生物科学研究所：CYP 研究会設立について
  - ②次世代モダリティ研究所：次世代モダリティ研究会発足について
  - ③先端領域 ELSI 研究所：分子ロボット倫理研究会発足について
- (2) 職業紹介責任者に関する講習会について

### 第 10 回運営会議

日時：2021 年 12 月 10 日 (金) 10:00-10:50

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 研究所の進捗報告
  - ①量子構造生物科学研究所：中性子産業利用推進協議会との合同シンポジウムについて
  - ②次世代モダリティ研究所：第 1 回次世代モダリティセミナー開催について
  - ③先端領域 ELSI 研究所：分子ロボット倫理研究会発足の報告
- (2) 研究所の銀行口座に関して
- (3) 有料イベントおよび個人会費を徴収した場合の経理処理について

## 第 11 回運営会議

日時：2022 年 1 月 19 日 (水) 10:00-10:30

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 研究所の経理手続きに関して
- (2) 研究所の進捗報告
  - ①量子構造生物科学研究所：中性子産業利用推進協議会との合同シンポジウムについて
  - ②次世代モダリティ研究所：第 1 回次世代モダリティセミナー開催について
  - ③先端領域 ELSI 研究所：分子ロボット倫理研究会のキックオフ (3 月 11 日予定) について

## 2022 年大会プログラム委員会

---

### 第 1 回 2022 年大会プログラム委員会

日時：2022 年 1 月 24 日 (月) 13:00-15:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

報告：(1) プログラム委員の自己紹介

- (2) 2022 年大会概要説明
- (3) 2022 年大会プログラム説明

協議事項：(1) 2022 年大会プログラム時間枠 (案) について

- (2) 2022 年大会カテゴリと参考キーワード (案)
- (3) 口頭発表・ポスター発表 募集 (案)
- (4) 口頭発表枠 (案)
- (5) フォーカストセッション 企画提案募集
- (6) 展示会場レイアウト (案)
- (7) 大会までのスケジュールについて

## 2022 年大会実行委員会

---

### 第 1 回 2022 年大会拡大実行委員会

日時：2021 年 12 月 13 日 (月) 17:00-18:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 実行委員のメンバー確認と担当決め

- (2) 広報ポスターについて
- (3) ポスター・展示会場のレイアウトについて
- (4) スポンサーの募集について
- (5) 大会までのスケジュールについて、定例実行委員会の日程決め

# 学会事務局からのお知らせ

CBI 学会では、化学と生物学の境界領域における計算機と情報学の応用（Chemo Bio Informatics）において著しい業績をあげ、Chem Bioinformatics の発展に貢献した方に対して CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞を授与いたします。

## 2022 年度 CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞 募集要領

### 【CBI 学会賞】

- ・ Chemo Bio Informatics の領域において、長年にわたり 顕著な業績をあげた CBI 学会員もしくは名誉会員。

### 【CBI 学会若手奨励賞】

- ・ Chemo Bio Informatics の領域において独創的で優れた研究を成し遂げ、将来の活躍が期待される CBI 学会員もしくは学生会員。ただし、2022 年 4 月 1 日において満 39 歳以下の方に限ります。

### 【授与人数】

CBI 学会賞 1 名、CBI 学会若手奨励賞 1 名、ただし、該当者がいない場合は、該当者なしといたします。

### 【提出書類】

1. 候補者の氏名、略歴
2. 推薦者氏名、推薦理由
3. これまでの研究業績
4. 主な論文一覧

上記書類を PDF ファイルにてお送りください（様式は問いません）。

### 【応募締め切り】

2022 年 3 月 31 日（木）必着。

### 【提出先】

CBI 学会事務局 : [cbistaff@cbi-society.org](mailto:cbistaff@cbi-society.org)

CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞は CBI 学会 2022 大会にて授与いたします。自薦、他薦を問いませんので、積極的なご応募をお願いいたします。

本件に関する質問等は、CBI 学会事務局までお問合せください。

### 【問い合わせ先】 CBI 学会事務局

[cbistaff@cbi-society.org](mailto:cbistaff@cbi-society.org)  
電話 : 03-6435-0458  
〒 108-0023  
東京都港区芝浦 3-11-1  
キョウワクリエイティブ第一ビル 3 階



## 編集後記

2022 年最初の本号の巻頭言は、2007 年大会を広島大学で開催し、学会として初めて地方開催された相田先生にお願いしました。大会の講演には、多くの広島大学の学生が教育の一環として参加されていたのを記憶しています。さて、拝読すると「DX への関心は確かに急速に大きくなりましたが、それが社会に、あるいは研究の場に、浸透しつつあるか、というと、そうは思えない」と記されています。同感の念をいだとともに、それはなぜなのか？という疑問が湧きます。やはり社会に科学が（足り）無いからなのか…

ホットトピックスは、前号から担当が CBIJ 分野長から若手の会へと移り、本号では黒田先生に執筆頂きました。Journal of Cheminformatics に掲載された確率的ランダムフォレストが紹介されています。CBI 研究機構便りでは、量子構造生命科学研究所による第二回シンポジウムの報告を上村先生より寄稿頂きました。興味深い内容と感じつつ目を通していくと、引き続き合同シンポジウムが開催されるとの案内も本号にあります。興味を持たれた方は今からでも（発刊日時点です）。CBI 若手の会コラム（第 2 回目）では、若手の会キャリア第 1 回として池田先生からの寄稿です。“～に一筋”のキャリアでは無く、様々な経験が紹介されています。有休取得なども含め、働き方改革が叫ばれる昨今、今後はさらに様々な価値観により“働き”の形が多様化していくのでしょうか。その参考のためにも今後の紹介記事も乞うご期待。

CBIJ 便りでは、著者の小西先生より掲載論文の解説をして頂きました。「COVID-19 が流行しはじめたとき、～複雑なデータを、系統樹なんて古い方法論で扱えるわけありません。そこで、公開データをつかって計算してみました。」と興味深い解説に惹かれ、専門外の論文はついつい見逃してしまいがちな中、CBIJ 掲載論文に目が止まりました。本号に寄稿頂きました皆様に御礼申し上げます。(T. M.)

---

## CBI 学会誌 第 10 卷 第 1 号

2022 年 3 月 1 日発刊

CBI 学会誌編集委員会：水間 俊、高岡 雄司

制作：小澤 陽子 藤田 真澄 塩塚 真理 牛尾 律子 岸 早絵

高澤 恵 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。

