

CBI学会誌



CBI学会2023年大会
"Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2023"

**大規模データが切り拓く
次世代ヘルスケア**
～ゲノム情報・診療情報が創り出す新しい創薬と医療～

2023
10.23 MON - 10.26 THU

会場 **タワーホール船堀**
東京都江戸川区船堀4-1-1

大会長：山本 雅之
(東北大学 東北メディカル・メガバンク機構)

実行委員長：萩島 創一
(東北大学 東洋型医療創成センター / 東北メディカル・メガバンク機構)

プログラム委員長：夏目 やよい
(国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)



第 11 巻第 2 号
2023 年 6 月 1 日発行

巻頭言

変革を現実のものとするために

澤田 光平

PEIJ 一般社団法人日本薬理評価機構

第 5 回ワールドベースボールクラシック（WBC）で日本チームが 14 年ぶりに優勝し、野球ファンだけでなく多くの日本人を歓喜の渦に巻き込んだことは記憶に新しい。この優勝には大谷翔平という飛びぬけた才能の発揮があったことが大きな要因としてあげられる。大谷選手がアメリカに渡り投手及び打者として二刀流で活躍し、大リーグはその活躍を後押し、野球人気を盛り上げるためにルールを変更を行い、「大谷ルール」を作った。今回の WBC でもこのルールが適用された。

医薬品開発において心電図 QT 間隔延長に伴う不整脈誘発が課題であり、非臨床／臨床安全性ガイドライン ICHS7B / E14 に基づき、hERG イオンチャネル抑制および QT 延長作用が検討され、hERG ポジティブ、QT 延長化合物の多くがふるい落とされている。私が CBI 学会大会長を務めた 2014 年当時、評価の軸足を hERG / QT から “*in silico* および iPS 細胞由来心筋細胞” を用いた催不整脈性にシフトさせ、併せてガイドラインの変更を目指す活動 Comprehensive *in vitro* Proarrhythmia Assay (CiPA) が開始された。この活動が成功すれば、hERG / QT ポジティブでも不整脈誘発の危険性が低く、有用性のある化合物が救えることになる。既存医薬品 28 種を用いて作成した *in silico* および iPS 心筋の評価モデルは、催不整脈性リスク予測では hERG / QT を上回る精度を示したと思われる。しかし、昨年ガイドライン Q&A が成立し、当初もくろんでいたガイドライン変更という提案は達成できなかった。“*in silico* と iPS” は大谷選手の二刀流とはいかなかった。*In silico* / iPS 心筋評価系いずれもモデルの完成度、実験データの精度など解決すべき課題はまだあるが、臨床において不整脈リスクの高い QT 間隔延長と安全な QT 延長を見分ける方法が確立されていないことも、催不整脈性を評価の中心に持っていけなかった大きな要因であると考えられる。

CiPA を追いかけるように、昨年末、アメリカで FDA 近代化法案が成立した。この法律は動物実験の実施なしでも新薬申請を可能にするというものである。バイオロジックス等ヒト選択性の高い医薬品を含め、動物実験の結果がヒトへの外挿性が必ずしも高くないことはしばしば経験され、コストと動物の命が無駄に消費されているのではないかという指摘もされていた。動物を用いずに、より高い精度でヒトでの有効性と安全性を予測するための手法として、シミュレーションなどのコンピューターモデリングおよび microphysiological system / organ-on-chips などがあげられており、まるで、CiPA 第 2 弾のような感じである。この法律を受けて欧米の *in silico* / *in vitro* 関連企業は一斉にアクセルを踏み始めているが、日本では大きな動きは感じられない。*In silico* や iPS など new modality が変化を生む力となるためには、更なる技術レベルの向上が必要であるが、それと共に薬を認可、使用する側の高い納得性を勝ち得ることが非常に重要であろう。日本の得意とする技術を活かし、創薬に変革をもたらすチャンスであり、日本からも多くの革新的な評価方法が生み出されることを期待する。

目次

(1) 巻頭言 「変革を現実のものとするために」	
澤田 光平 (PEI 一般社団法人日本薬理評価機構)	1
(2) ホットトピックス「腸内細菌研究での機械学習およびディープラーニング活用」の紹介	
朴 鐘旭 (株式会社明治 研究本部乳酸菌研究所基盤微生物研究部マイクロバイオームグループ 医薬基盤・健康・栄養研究所 AI 健康・医薬研究センター)	3
(3) CBI ジャーナル便り (27)	5
(4) CBI 研究機構便り	
量子構造生命科学研究所 第三回シンポジウム報告	
上村 みどり (量子構造生命科学研究所所長)	6
次世代モダリティ研究所 第 5 回次世代モダリティセミナー	
坂田 恒昭 (大阪大学共創機構)	10
(5) 若手の会コラム第 7 回 シリーズ企画「若手の会キャリア (第 5 回)」	
「私のキャリアパス紹介」～研究者からビジネスマンへ～	
高岡 雄司 (ダッソー・システムズ株式会社)	12
(6) 講演会報告・予告	17
(7) 研究会報告	
計算 ADMET 研究会主査就任の挨拶	
植沢 芳広 (明治薬科大学医療分子解析学研究室)	24
(8) 委員会報告	25
(9) 編集後記	29

表紙デザイン：

CBI 学会 2023 年大会ポスターより (<https://www.cbi-society.jp/annual-meetings/2023/>)

Hot!!!

TOPICS

～最新文献の紹介

「腸内細菌研究での機械学習およびディープラーニング活用」の紹介

朴 鐘旭

株式会社明治 研究本部 乳酸菌研究所 基盤微生物研究部
 マイクロバイオームグループ
 医薬基盤・健康・栄養研究所 AI 健康・医薬研究センター

Hernández, R.; Kutuzova, S.; Nielsen, KN.; Johansen, J.; Hansen, LH.; Nielsen, M.; Rasmussen, S. Machine learning and deep learning applications in microbiome research. *ISME communications*, **2022**, 2.1: 98.
<https://doi.org/10.1038/s43705-022-00182-9>

腸内細菌研究は人間の健康と病気、医薬品およびバイオ研究の分野で非常に重要な研究分野となっている。腸内細菌情報を成功的に活用するためには、腸内細菌の群集と機能を構成し、影響を与えることが何か、腸内細菌内の特定種が他の種より重要なのか、構成と機能を操作できる方法と程度に対する理解が必要であるが、腸内細菌や生活習慣、遺伝子情報などを含む特徴は高度に個人化されており、これらの相互作用を理解することは容易ではない。腸内細菌の複雑さを解決する鍵として人工知能が注目されている。今回のホットトピックでは、このような新しい技術が腸内細菌構成要素の相互作用と表現型との関連を研究することにどのように活用できるかについて解説した最近の論文を紹介する。

本論文では、機械学習とディープラーニングを活用して腸内細菌データの分析とモデリングを改善する方法を探索している。著者らは機械学習とディープラーニングは、従来の統計的分析方法よりも腸内微生物データの複雑さを扱うのに適しており、より正確で効果的な結果が得られ、結果的に腸内細菌データを多様な応用分野で分析できるようになると説明している。

腸内細菌データを活用するためには、まずデータのタイプを把握することが重要である。近年、omics および high-throughput sequencing の発展により細菌群集に対する包括的な説明と大規模細菌群集データセットを生成できるようになった。このようなアプローチは、サンプル当たり特定の分類群または機能の豊富さを示すテーブルを生成することになる。構成データはコンポーネント間の関係を説明するため、その部分は独立しておらず、合計は任意である。また、フィーチャーテーブルは一般的に希薄で過度な 0 カウントがあるため、データセットの一般化は難しいため、対数比率変換、stay-in-the-simplex アプローチおよびコンポーネント比率計算のような統計的処理方法が確立された。

それぞれの分野での機械学習アルゴリズムについて、疾病予測及び分類では主に指導学習アルゴリズムが使用され、ナイーブベイズ、意思決定木、ランダムフォレスト、サポートベクトルマシンなどのアルゴリズムがよく使用される。群集化は非指導学習の一例として、遺伝子の発現量、代謝体プロファイルなどのデータに基づいて類似の細菌群集をグループ化するのに使われ、主に K- 平均群集化、階層的群集化、DBSCAN などのアルゴリズムが使われる。腸内細菌の機能予測は、Gene Ontology、KEGG pathway などのデータベースを活用して予測モデルを構築する。時系列データ分析では RNN がよく使われており、こ

れを通じて細菌のライフサイクル、成長パターンなどの時系列データを分析することができる。最後にデータ視覚化は、PCA、PCoA、t-SNE などの次元縮小アルゴリズムがよく使われ、その結果を scatterplot、heatmap、network などの多様なグラフで視覚化する。

さらに、この論文では機械学習アルゴリズムを利用して腸内細菌データを活用する際の注意点と解釈時の正しい流れについて説明している (fig.1)。入力データを解析する前にデータを理解し、正しく目的に合わせてキューレーションする必要があると強調している。また、適切なアルゴリズムを選択するための事前検討、有効性検討が重要であると説明している。

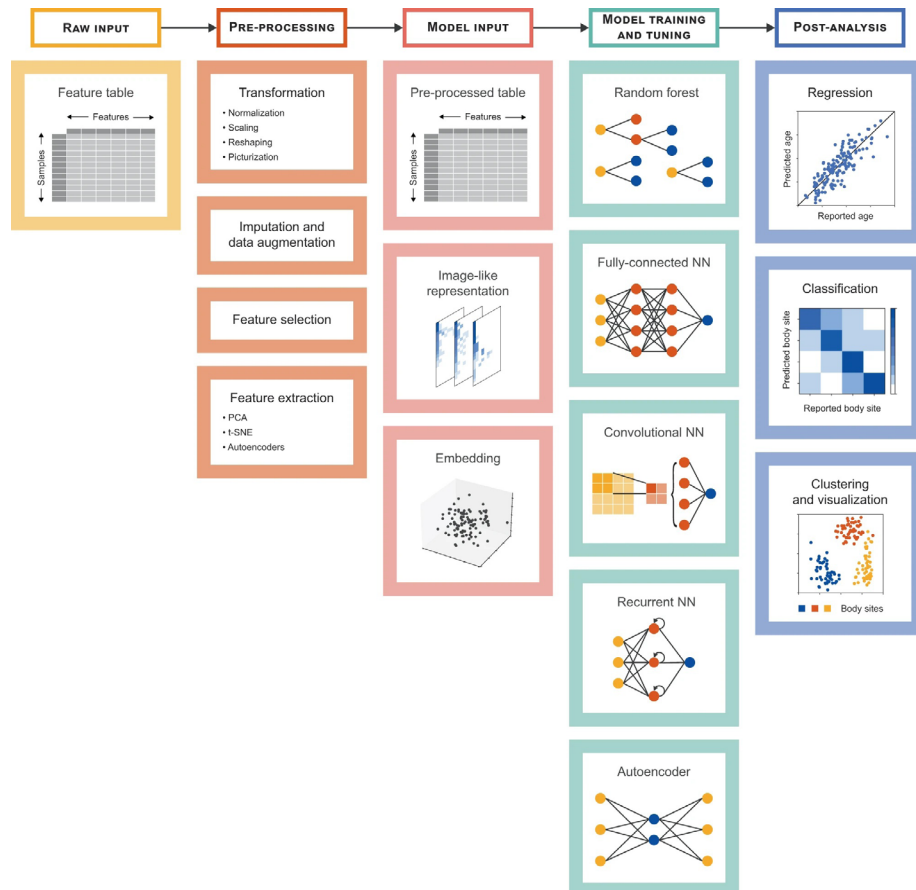


Fig. 1 Key steps of ML-assisted microbiome analysis. (Fig.2 in the original paper)

この論文では、人工知能が腸内細菌研究分野に適用された多様な例を提示し、これらのモデルを使用する際に考慮すべき事項リストを提供している。データ利用可能性とモデル解釈可能性に対する現在のボトルネック現象に対して、追加的な研究はディープラーニングが腸内細菌を含む微生物研究分野で活用できる範囲を広げ、私たちが生きている世界を成す微生物相互作用に対する理解をさらに拡大させることができると著者は説明している。今後、本論文の紹介している人工知能技術を用いた最先端の解析法とともに、蓄積していく膨大なデータを適切に活用することで、腸内細菌叢を理解し、我々の健康に更なる貢献ができることを期待している。

※図は、原著 Hernández, R.; Kutuzova, S.; Nielsen, KN.; Johansen, J.; Hansen, LH.; Nielsen, M.; Rasmussen, S. Machine learning and deep learning applications in microbiome research. *ISME communications*, **2022**, 2.1: 98.

<https://doi.org/10.1038/s43705-022-00182-9> からの転載

原著は Attribution 4.0 International (CC BY 4.0)



著者が紹介する CBIJ 掲載論文

◆ opinion

How Beneficial or Threatening is Artificial Intelligence?

AI は人類の救世主となり得るか、それとも驚異か？

高木 達也

大阪大学大学院薬学研究科

32 世紀、宇宙船 Discovery の AI、Zora は進化して感情を持った。座標を示せという命令に危険だからと従わなかった (Star Trek Discovery)。2001 年、木星探査船 Discovery の AI、HAL9000 は自らの停止を恐れて乗組員の宇宙服を船外で破壊した (2001: A Space Odyssey)。

以上はフィクションでの出来事で、実際に 2001 年に木星探査は行われなかったし、AI が感情を持つのに 1000 年も待つ必要は無いだろう。この意見論文脱稿直後に話題になった OpenAI 社の GPT4 は意思を持っているかの様な完璧な回答を寄せる。その有用性は計り知れないが、ある大手 IT 企業の CEO はその発達に警鐘を鳴らした。

近年の AI の発達 は加速度的である上に、単なる「強い人間」ではなく、将棋では人間が考えつかないような手 (初手の 3 八金) で勝つこともある。化学・物理学分野では、AlphaFold2 や MATLANTIS™ が与えた衝撃は大きい。近未来に、化学反応や生体内薬物動態のシミュレーションは実現されるだろう。医薬品の分子設計は勿論である。

こうした時代に若い方々は生きていくことになる。研究テーマも AI が解決できる様なものは捨て去る時が来よう。リーマン予想は AI が解決可能かもしれない。しかし、如何に AI と雖もリーマン予想を提案することは出来ない。私達は AI が齎す素晴らしい成果を享受すると同時に、「彼女ら」の動向に注視しなければならなくなったのである。

紹介 : 高木 達也 (大阪大学大学院薬学研究科)

2023 年 2 月 20 日公開

Chem-Bio Inform. J. 23 (2023) pp. 7-13.

<https://doi.org/10.1273/cbij.23.7>

CBI 研究機構便り

量子構造生命科学研究所 第三回シンポジウム報告

CBI 研究機構 量子構造生命科学研究所 所長

上村みどり

(中性子産業利用研究会 生物生体材料研究会 主査)

「MicroED の現状と未来」

- ◆開催日：2022 年 12 月 6 日（火）12:55 ～ 17:25
- ◆オンライン開催（Zoom ミーティング）
- ◆共催：中性子産業利用推進協議会 / 中性子構造生物学研究会 / 生物生体材料研究会
- ◆参加費：無料

- ◆概要：日本のアカデミアから新進気鋭の研究者に講演いただいた。合わせて、米国、中国より、MicroED をサービスとして提供されている CRO を米国、中国よりお招きしての非常に内容の充実したシンポジウムとなった。

- ◆プログラム
 - 13:00 はじめに 上村みどり
 - 司会：上村 みどり
 - 13:00-13:40 「KEK クライオ電子顕微鏡施設における MicroED 測定の試み」
山田 悠介 (KEK)
 - 13:40-14:20 「MicroED と SPring-8/SACLA から得られる結晶構造とその利用」
高場 圭章 (理研)
 - 司会：葦原 雅道 (Thermo Fisher Scientific)
 - 14:20-15:00 "Combination of SPA and microED techniques guides
the optimization of PROTAC system"
Dr. Jack Yan (Biortus Biosciences Co.)
 - 15:00-15:40 "MicroED in Nanoimaging services"
Dr. Jessica Bruhn (Nano Imaging Services)
 - 15:40-15:50 Break
 - 司会：上村みどり
 - 15:50-16:30 「溶液散乱と micro-ED の相補的解析に向けて」
井上 倫太郎 (京大)
 - 16:30-17:20 「ハイスループット測定による高多重度 MicroED から
見えてきたものと今後の課題」
中根 崇智 (阪大・蛋白研)
 - 17:20 おわりに 佐藤 衛 (横浜市大)

1. 「KEK クライオ電子顕微鏡施設における MicroED 測定の試み」

山田 悠介 (KEK)

共用大型放射光施設である高エネルギー加速器研究機構 (KEK) にある構造生物学研究センター (SBRC) は、放射光施設フォトンファクトリー内にあるタンパク質 X 線結晶構造解析や溶液 X 線散乱のためのビームラインの開発・運営を行うほか、構造生物学実験ラボにおいてタンパク質結晶化スクリーニングシステムの開発・運営なども行いさまざまな手法開発をおこなっている。2018 年 3 月に加速電圧 200 kV のクライオ電子顕微鏡 Talos arctica が導入されてからは、このクライオ電子顕微鏡を用いた単粒子解析も学術利用や産業利用に提供している。合わせて、高度化研究のためのマシンタイムの一部を利用して MicroED 測定の技術的検証を行っている。国内の MicroED 研究者の情報交換の場として Zulip という交換会に参加し、技術的検証を含めて情報交換を深めている。タンパク質結晶を用いた MicroED については今後挑戦していきたい。

2. 「MicroED と SPring-8/SACLA から得られる結晶構造とその利用」

高場 圭章 (理研)

電子顕微鏡を利用した三次元結晶構造解析 (MicroED/3D ED) は、実験室系 X 線回折 (XRD) ではターゲットにならなかった、1 μm 以下の結晶粒から回折像が得られるため、従来解析できなかった微小結晶の構造決定に期待が持たれている。近年は測定・解析ともに自動・高速化が著しく、なおかつマイクロフォーカスビームラインや XFEL の利用によって、数 μm サイズの結晶まで解析ターゲットになりうる。それぞれの利点を見極め、試料に応じて使い分けることは今後必要になる。最近、XFEL によるシリアルフェムト秒結晶構造解析 (SFX, SX) が低分子化合物結晶に対しても有効であることを報告し MicroED との相互補完利用をめざしている。電子線と X 線の両方で、同じ分子の微小結晶構造を、原子分解能で取得できた。両者で、原子配置に大きな差異は見出されなかったが、MicroED での座標決定誤差は数倍から 1 桁程度大きく、結合長を議論するには慎重を要する。VB12 では、両者の間で一部分構造が異なる例も見られ今後、さらに検証していく予定である。一方で、試料の電荷に対する感度は MicroED が大きく優れることを定量的に示すことができた。また、両手法での水素の可視化位置を有意差以上で区別することができ、相補解析で水素の極性が実験的に決定される可能性を示した。近年、AlphaFoldII で、分子骨格だけであれば、おおよそ計算で予測は可能な時代になってくるとは思うが、量子科学的な考察については、実験科学の貢献がまだまだ重要であり、ラショナルな分子デザイン等に役立てていきたい。

3. "See the intact PROTAC system at near-atomic resolution

by CryoEM and MicroED"

Dr. Jack Yan (Wuxi Biortus Scientific)

Biortus は中国 Wuxi 市にある構造生物学からドラッグデザインまで手がける CRO である。近年、新しいモダリティーとして注目されている E3 リガーゼを利用し疾患ター

ゲットを分解する PROTAC 分子を用いた系において、①どの E3 リガーゼを用いるか、②リンカーの最適化、③バインダーの強弱、④ PROTAC 分子のミニマイズ化等が課題であり、それらの課題に対して、Biotus 社では単粒子電顕解析と MicroED を併用した構造生物学に基づく SBDD で取り組んでいる。PROTAC 分子の構造決定は完全自動化された MicroED を用いて、1 サンプルあたり、1 分半で構造取得が可能である。絶対構造も直接決定できるので単粒子解析で取得したタンパク側の構造と合わせて、PROTAC 分子の構造最適化を実施している。

4. "Small Molecule Structure Determination by MicroED/3D ED in the

Pharmaceutical Industry: Succeeding When Other Techniques Fall Short"

Dr. Jessica Bruhn (Scientific Group Leader, MicroED | NanoImaging Services)

低分子の結晶解析は、創薬のなかで重要な役割を果たす、最安定結晶形を得ることは薬剤の開発で非常に重要である。HIV プロテアーゼ阻害剤のリトナビルの開発において、準安定構造で最終製剤化をしてしまったために、やり直すために 2.5 億 USD 損失をだした。それまで、単結晶 X 線解析で構造を得ることが長らくされてきたが、そこまで単結晶 X 線解析ができるような大きさにならないものが多く、その段階がボトルネックであった。それを粉末や、混合物のなかから、ほしいものを構造解析できるのが MicroED である。ナノイメージング社では、すでにこのような状況で 60 構造以上の構造を取得しており、その技術には定評がある。準自動化で簡単な構造の場合は、結晶をグリッドにのせてから、6 時間ほどで、構造を得ることができる。大体 2-10set データセットをとってからマージして使用している。結晶格子は確実に決まるが、空間群決定はチャレンジングである。データ処理に適さないフレームを除去することが大切である。また、低分解能データの位相決定は、困難である。Case スタディー 1 は原薬の kg スケールの製造の場合、副生成物の問題は避けて通れない。NMR でも X 線でも副生物の正体はわからない。MicroED で構造決定ができた。その構造を元にして、粉末 X 線のプロファイルをシミュレーションし、品質を管理することができる。ケース 2 の場合は、結晶化の手間を省くために、固相でのスクリーニングは、水や塩をさまざまな割合の条件で一番均一になる条件を探索するのにも、MicroED を使えろと考えている。

5. 「溶液散乱と Micro-ED の相補的解析に向けて」

井上 倫太郎 (京都大学複合原子力科学研究所)

講演者のグループは、75% 重水素化タンパク質は 100% の重水中で散乱的に不可視化できることを利用した逆転コントラスト変調小角中性子散乱 (iCM-SANS) で、溶液中のタンパク質複合体構造解析等に適用してきた。この iCM-SANS による、タンパク質複合体の注目部位のみを散乱データと X 線散乱で観測されるタンパク質複合体の全体構造の散乱データと計算機解析を組み合わせることで、溶液中のタンパク質複合体の構造を解くことができる。一方で、X 線・中性子散乱・計算解析による解析複雑な構造に挑んでいるため得られた解は本当に正しいのか？他に解はないのか？動的な構造を十分に考慮しているのかと言う疑問が常に残る。そのような状況を打開するには、電子線で解か

れた構造と溶液構造が比較でき、更に両者の構造と一致が見られれば解の一意制が実証できる。一方電子線由来の構造と一致が見られた場合でも、不一致の原因を追求できれば、より高精度な溶液構造解析に繋がると考えられる。以上より、X線・中性子散乱、クライオ電顕、計算機解析の統合解析により解かれたタンパク質複合体を例に紹介し、溶液散乱と電子線解析の相補的解析に向けてさらなる理解が深まることが期待できる。

6. 「ハイスループット測定による高多重度 MicroED から見えてきたものと今後の課題」 中根 崇智（大阪大学蛋白質研究所 特任准教授）

生体内の吸収に関係する溶解度に関係する結晶多形の問題は薬剤の開発において、重要な問題である。今まで、この問題は、X線解析で解決していたが、X線解析できないほど微小な結晶や MicroED は適応できる。固相合成などで作成した純度のあがらない混合物についても、講演者の開発した多重データ法は、アミノ酸や、糖や、医薬品のすべてに適応可能である。講演者らは共同研究者らと自動で複数のデータがとれる系を構築し、複数データのマージすることで、平均構造を決めているが、中には、1個しか高分解能にディフラクションしないものもあるし、いくつかの種類の結晶形が混じっているものもあるし、複数の化合物が混じっていることもあるなど現実には、ケースバイケースである。また、X線と異なり、電子は多重散乱を起こすので、やっかいであるがいろいろな方向からデータを取ることである程度は軽減することができる。実施した具体例としては sodium glutamate monohydrate (Ajinomoto®) を 0.65 Å on a Talos Arctica でベストの4セットをマージして構造解析し、tetracycline hydrochloride at 0.55 Å on a CRYO ARM 300 II では40個のデータセットをマージして構造解析に成功している。Alegra® 錠剤の the active pharmaceutical ingredient (API) 成分である fexofenadine hydrochloride が錠剤の粉碎物が再結晶化も再精製せずに、高分解能5セットをマージして、1.15 Å 分解能で、構造と組成式を決定できた。沢井製薬からでている atrovastatin も同様に錠剤を粉碎してみたところ、API のほかに、ラクトースの結晶をもディテクトできた。今後の課題としては、①温度に敏感な不安定な結晶、②溶液に含まれる結晶、③潮解性の結晶等をどう測定していくかがある。また、タンパク質では、リゾチームで実施しているが、タンパク質ならではの問題も多く、今後、チャレンジしていく予定である。講演者は、そのほかにも、MicroED の公開している生データを用いて、再解析し、プログラムの作者にフィードバックしプログラムの向上に積極的に貢献している。なお、AMED BINDS の大阪大学蛋白研の支援メニューとして、MicroED を掲げているので、ぜひ、支援を必要としている研究者の方は、BINDS のワンストップ窓口を利用してほしい。

(参加人数 123 名)

次世代モダリティ研究所 第 5 回次世代モダリティセミナー

2023 年 2 月 13 日 (月) ライフサイエンスハブウエスト / オンライン

CBI 研究機構 次世代モダリティ研究所 所長

坂田 恒昭 (大阪大学共創機構)



特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所では、関西医薬品協会及び LINK-J (一般社団法人ライフサイエンス・イノベーション・ネットワーク・ジャパン)、公益財団法人都市活力研究所と共催で、またバイオコミュニティ関西 (BiocK) の協力で、次世代のモダリティについての研究、製造の紹介や相互交流の場を提供することで、産学、産産連携などのオープンイノベーション推進を目指す次世代モダリティセミナーをシリーズで開催している。

今回のセミナーでは、埼玉大学大学院 理工学研究科 教授 根本 直人 氏より、「VHH 抗体創薬への進化工学的アプローチ」、国立研究開発法人産業技術総合研究所 バイオメディカル研究部門 研究部門長 萩原 義久 氏より、「VHH 抗体の抗体配列進化追跡法による *in silico* スクリーニング」、大正製薬株式会社 医薬研究本部 創薬技術研究室 室長 黒川 智文 氏より、「VHH の創薬研究・開発」について講演があった。また、各講師の講演後、特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所所長 (大阪大学共創機構 特任教授)・坂田 恒昭を座長としてパネルディスカッションが行われた。

当日の出席者は大阪会場が 15 社 20 人、オンライン配信登録者数は 380 社 773 人であった。

-- 記 --

日時：2023 年 2 月 13 日（月）14 時 00 分～16 時 20 分

大阪会場：ライフサイエンスハブウエスト

オンライン会場：ZOOM にてライブ配信

主催：関西医薬品協会、NPO 法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所、LINK-J（一般社団法人ライフサイエンス・イノベーション・ネットワーク・ジャパン）

プログラム：

14 時 00 分～14 時 05 分 「挨拶」

特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所所長
大阪大学共創機構 特任教授 坂田 恒昭 氏

14 時 05 分～14 時 10 分 「挨拶」

関西医薬品協会 理事長 國枝 卓 氏

14 時 10 分～14 時 40 分

「VHH 抗体創薬への進化工学的アプローチ」

埼玉大学大学院 理工学研究科
教授 根本 直人 氏

14 時 40 分～15 時 10 分

「VHH 抗体の抗体配列進化追跡法による in silico スクリーニング」

国立研究開発法人産業技術総合研究所 バイオメディカル研究部門
研究部門長 萩原 義久 氏

15 時 10 分～15 時 40 分

「VHH の創薬研究・開発」

大正製薬株式会社 医薬研究本部 創薬技術研究室
室長 黒川 智文 氏

15 時 40 分～15 時 45 分 「休憩」

15 時 40 分～16 時 20 分

「パネルディスカッション」

座長：特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・
次世代モダリティ研究所所長
大阪大学共創機構 特任教授 坂田 恒昭氏

パネリスト：講師の先生方



CBI 若手の会コラム (第 7 回)

シリーズ企画「若手の会キャリア (第 5 回)」

「私のキャリアパス紹介」

～研究者からビジネスマンへ～

高岡 雄司

(ダッソー・システムズ株式会社)

1. はじめに

私は大学院で修士号取得後、製薬企業の研究所で長らく研究員として働き、そこで論文博士も取得させて頂きながらその後外資系のソフトウェアベンダーに転職しました。以来肩書はアプリケーション・サイエンティスト、ソリューション・サイエンティスト、インダストリー・プロセス・コンサルタント、ソリューション・コンサルタント等毎年のように変わってはいますが、基本的にはプリセールス（日本語では技術営業でしょうか）としてソフトウェアの販売に携わっております。これまでこのコラムに執筆してこられた先生方はいずれも輝かしい経歴をお持ちの研究者で、所属を変えながらステップアップし、道を切り開いて来られたように見えますが、私の転職は下記の通りたった一度、しかも研究職ではありません。管理職も経験はしましたが順調に階段を上がっているわけでもありません。寄稿の依頼を頂いた際、このような者の経歴の話が CBI 学会に所属する方々の役に立つかどうか悩みましたが、モノを買う立場から売る立場への転職は私の人生にかなり大きなインパクトを与え、博士号取得者がビジネスに関わるようになる意義についてもあまり知られていないのではないかと考え、書かせて頂くことにしました。

2. これまでの軌跡

 学位：2007 年 博士（薬学） 徳島大学

経歴：

1993 年～ 2010 年 大正製薬株式会社

2010 年～ 2018 年 アクセルリス株式会社

2018 年～ ダッソー・システムズ株式会社（買収により転籍）

3. 計算化学者への道とその卒業

大学 4 年時に計算化学系の研究室へ進んですぐ、周りの人間のあまりの優秀さに圧倒され（自分がいかに緩い 3 年間で過ごしてきたかを思い知らされ）た私は、予想通りその研究室での大学院への進学もならず、同期の友人に教えてもらった別の大学の研究室を受験、何とか滑り込むことができました。そこでは当時大正製薬と行っていた脂質二重層膜の分子動力学計算（MD）の研究を受け継ぎ、修士号を取得しました。その後、そのままのテーマで研究を続けても良いと言われた事と、大正製薬から奨学金を頂いていたこともあり、そのまま採用して頂きました。薬に関して全く無知だった私が製薬企業に採用されたのは、奨学金を受け取るための簡単な試験や面接を受けた（後になって思えば採用試験でした）のがちょうどバブルがはじける直前だったことも関係しているかもしれません。

もちろん民間の製薬企業の研究所ですから、膜の MD 計算ばかりをやっているわけもなく、計算科学の技術を活用した創薬研究にも従事するようになり、当時の CBI 研究会にも参加、勉強させて頂くようになりました。

その後物理ベースのシミュレーションだけでなく、QSAR や毒性予測など統計手法を使うようになっていきます。High Throughput Screening と Combinatorial Chemistry 技術の浸透によって、扱う化合物数とそのデータ量が飛躍的に増えたことがその背景にあります。

一方膜の MD 計算はなかなか博士論文にまとめられず、ご指導頂いていた教授が古巣の京大に移られた頃には半分諦めかけていたのですが、徳島大学の中馬寛先生（計算・理論創薬化学）から「うちで取らないか」とお声がけ頂き、ようやく博士論文を仕上げたころには就職して 10 年以上が経っていました。

博士号を取得したからと言って会社内での仕事や立場が変わるわけでもなく、その後も暫くは創薬研究を計算化学でサポートする仕事を続けていました。しかしながらその頃には、自分のやっていることはアカデミアで言うところの「研究」ではないと感じていました。何か解明したい謎があり、それを解きたいという動機に突き動かされて活動しているのではなく、外から与えられた課題を解くために自分の知見や技術、経験を使っていただけだったからです。また、将来に関して漠然とした不安を抱き始めたのもこの頃です。企業ですから常に新陳代謝は必要で、若い研究者を採用して育てる必要がある一方で、ポストの数が際限なく増えていくわけではないですから、研究者としてずっと現場で研究を続けられるのはごく一握りです。中堅と言われる年齢になって以降、一部はその部署の管理職として残るかもしれませんが、それ以外は企画部門やその他の管理部門に異動するか、運よく自分が関わった化合物が上に進めば、そのまま開発部門に移ったりするケースもありました。しかも私が入社した年には同じ計算化学の部署に同じ年齢の研究者が 3 名同時に入社していたため、いつかはここを離れる日が来るのではないかと考えていました。

実際に次年度からの本社への異動を打診されたのが 2009 年末頃です。自分でも納得して受け入れ、スーツを新調して準備していたのですが、翌年の 2 月に受け取った電話で何もかもが変わってしまいました。

当時私は研究室直通の外線電話に近い席に座っていたため、年中かかってくる不動産投資の勧誘電話を断る役割を一手に引き受けていました。しかしその日の電話は当時のアクセルリス株式会社の営業からで、私も使っていた分子シミュレーション用ソフトである Discovery Studio という製品のプリセールスをずっと募集しているのだが良い応募がなく、誰か紹介してくれないか、という内容でした。その頃の私は CBI 学会などでも発表の機会を頂いたりしており、その営業とも学会で会う機会が度々あったため、私の人脈を頼って連絡してきたとの事でした。すぐには思い浮かばなかった為に改めて連絡する旨伝えて電話を切ったのですが、「プリセールス」という職種が何をするものかを調べていくうちに、もしかしたらこれは自分向きの仕事ではないかと思うようになっていきました。

最近では日本の IT 企業にもプリセールスの職種を置くところが増えているようですが、少なくとも当時の私には全く新鮮に見えました。要するに営業と一緒に顧客や見込み客を回って彼らが抱えている課題をヒアリングし、それを解決するためにはこのソフトがどのように役立ちますと説明する役割で、それまで自分が社内で行っていた仕事とそれほど変わらないと感じたからです（もちろん、自分でやるか、人にやり方を教えるかの違いはありますが）。マーケティング活動のために自らソフトを使った研究を行い、論文や学会発表を行うことも job description に記載されていました。さらに自ら開発した手法がソフトに新機能として採用される場合もあるそうです。これなら本社に異動して新たな仕事に就くよりも、自分の経験をより広く社会に還元できるのではないかと考えた次第です。十分恩返しができていたわけではありませんが、いずれにしても大正製薬でお世話になっていた上司のレポートラインからは外れる予定だったことも後押しし、次の日には「僕ではダメでしょうか」と電話を返していました。その後トントン拍子に話が進み、その年の 4 月からアクセルリスで働くことになったわけです。



4. プリセールス

さて、漠然と計算化学が続けられるとの思いで転職したものの、すぐに大きなカルチャーショックを受けることとなります。その理由を幾つか挙げていきたいと思いますが、これにはほぼ国内を対象にビジネスを行っていた会社から外資のグローバル企業に移った事と、大企業から（日本の現地法人としては）小さな会社に移った事も関わっていると思います。

1) 頭を下げられるお客様から頭を下げる営業になった

思った以上に大きな違いでした。自分の生きてきた世界がどんなに狭かったかを思い知らされました。

研究所は基本的にはコストセンターとして分類されると思います。利益を生む場所ではなく、消費するからです。研究者は常に試薬や実験機器、ソフトウェアを購入する「お客様」で、出入りする「業者」を少し下に見て対応される方もいらっしゃるように思います（幸いにも以前から私の事を知っている方々からはそのような対応をされたことはありませんが）。しかしながらいつも笑顔を絶やさずにいるように見える営業は実はしたたかです。驚くほどお客様をよく見えています。ベンダーとの打ち合わせの際、よく複数のメンバーが来社して、常に皆カタカタとキーボードを叩いていますが、あれは決して内職をしているわけではありません（おそらく）。お客様のお言葉を丁寧に記録し、誰が何に詳しくてどのように考えているか、誰の方を向いて話をしているか、誰とつながっているか、誰の言葉が重く見られているか、等々を詳しく観察しているのです。社に戻った後、名刺から構築される組織図だけではなく、誰がスポンサー（味方）なのか、誰がインフルエンサーなのか、誰が反対に回りそうか、等々を確認し、その後の営業活動の戦略を練ることになります。それまでは自分達がそのように観察されているなんて思いもしませんでした。後で考えると納得することもありました。例えば後で聞いた話ですが、私に転職者の紹介をして欲しいと電話をかけてきた営業は、実は初めから私に狙いを付けていたそうです。その電話の数か月前、ある学会の懇親会の席で、私が酔って仕事の愚痴を漏らしたのを聞き逃していなかったのです。

2) 責任範囲が明確

アクセルリスに入社して私に与えられたミッションは、当然ですが担当製品の売り上げを伸ばすことでした。しばらくして先輩プリセールスが別の製品担当になった後は、その製品の日本における売り上げは私の責任ということになります（ちょっと極端な言い方ですが）。では何をすればよいのか、自分で考えて計画を立て、営業やマーケティング、サポート担当をも巻き込んで行動していく必要があります。何をするのも自由ですが、（コンプライアンスも含めて）全ての結果責任も自分にあります。勤務時間や勤務場所は重要ではなく、数字としての結果のみが評価されます。まるで一人の独立した事業者になったかのようなようでした。それまでの大企業から、少人数で法務、人事、経理も含めた全てをこなす会社に移ったのですから責任範囲が広がるのは当然かもしれませんが、それ以上に西海岸の会社であることに依る、シンプルな組織とカルチャーが大きく効いていたように思います（その後フランスの会社を買収されたことでこのカルチャーの違いを思い知りました）。当初は自分で自由に工夫できることが面白くて仕事にのめりこんでいき、ビジネスに関して多くの事を学びました。

ビジネスと言えば、研究者の資格としても捉えられる学位としての博士号に対して、ビジネスマンとしての学位に経営学修士（MBA）があります。欧米では PhD と MBA の両方を持つ人材をよく見かけますが、私の知る限り先に PhD を取得した後 MBA を取るケースの方が多いようです。研究者がビジネスに転身した後、そこでのスキルを学ぶために MBA を取得するというパターンです。研究者としての仕事から得られたアイデアを社会実装するために起業し、必要に迫られて経営を学ぶ方もおられるでしょう。私ももう少し若いときに転職していたら挑戦していたかもしれません。たとえ一人二人で細々とソフトを売っているのだとしても、大きな組織のリーダーが身に付けるべきビジネススキルの、少なくとも一部は必要とされるからです。もちろんこれには研究活動で身に着くスキルとは異なる部分もありますので好き嫌い、向き不向きはあるかもしれませんが。ただ少なくとも私にとっては 40 歳を超えて初めて見る世界で、とても新鮮に映りました。

3) 変化が速い

転職して既に 13 年が経過しましたが、とにかく仕事に慣れたという感覚を持てません。毎年どころか月単位で環境や組織等の状況、利用するツールや仕事の範囲が変化していき、常に学ぶ必要があります。私が転職した当時、販売していたソフトウェアは 3 種類だけで、どれも主に計算化学者を対象としたものでした。しかしその数日後、私の歓迎会を行って頂いている席上で誰かが買収のニュースに気づき、そのビジネスは会社全体の半分

になってしまった事を知らされました。化合物情報管理システムや試薬データベースなどのコンテンツ、さらに電子実験ノート等を製造販売していた Symyx (旧 MDL) と合併したのです。

その後も様々な会社を吸収合併しては扱う製品の数が増えていき、製薬業界を対象に研究から製造までをカバーできる IT ベンダーとなったところで Dassault Systèmes に買収されました。この間、さすがに Discovery Studio だけを扱っていれば良いというわけにはいかず、様々な業務領域に対応できるようカバー範囲を広げていく必要があり、肩書も“〇〇・サイエンティスト”のようなものから“〇〇・コンサルタント”に変わっていきしました。文字通り IT コンサルタントの役目を果たす必要が出てきたわけです。もはや科学者ですらありません。

組織も頻繁に変わります。その度に名刺を作り直すのがもったいないくらいです。私の直属の上司も目まぐるしく入れ替わっており、レポート先はこの 2 年の間に、日本、シンガポール、フランス、インド、と変わってきました。こういった変化を楽しんで受け入れられるか、自分の仕事ではないと拒否するか、によってその後の展開が大きく変わってくると思います。

5. 自らの市場価値について

さて、皆さんも今の自分の報酬が適正であるかどうか、考えてみたことが一度や二度はあるのではないのでしょうか。私の転職前の認識は、製薬企業なんだから他の業界よりは多少ましなはず、でも大手に比べると少し見劣りするかな、程度のものでした。

ところが転職後、すぐにヘッドハンターから声が掛かるようになりました。前職時代にはなかったことです。当時は戸惑いましたが、今考えれば当然で、要するにそういったスペックを持つ人材が少ないのです。こういった人材かと言えば、

- ① ライフサイエンス系の知識があり、研究者と話ができる
- ② 営業としてのビジネススキルがある
- ③ (日本語と) 英語でコミュニケーションできる

ような人です。①は製薬研究者出身で一応 Ph.D. 持ちなので当然です。②と③は外資系企業のプリセールスという肩書から(実態はともかく)自動的に付与されたフラグです。

それぞれができる人材は山ほどいます。ただ、複数を満たす人材は掛け算で減っていきますので、上 3 つだけでも兼ね備えた人の数は極端に少ないのです。実際これに加えて、例えば最近であれば機械学習、プロジェクトマネジメント、DX を推進できる IT の素養、等々がある人材を探しているという話をよく聞きますが、簡単には見つかりません。希少な人材は各企業が欲しがるところとなり、好むと好まざるとに関わらず転職市場に放り込まれることになるのです。複数のスキルを持った人にはそれだけ市場価値があるということです。

残念ながら今でも時々、企業としては博士を雇いにくいという話を聞きます。その分野で誰も成し得なかった研究を行って一人前になったという自負からか、他の領域の仕事をやりたがらなかったり、やっても身が入らなかったり、という背景があるように思います。私も本社への異動を打診された時、研究者としては否定されたように感じたのが正直なところ。ただ、これは企業で働くかどうかに関わらず、自らの領域を広げることはとても大事だと思います。皆さんも I 型から T 形(一つ分野に秀でており、かつジェネラリストとしても働ける)や Π 型(ダブルメジャー)に進化すべきだ、という話はお聞きになったことがあるのではないのでしょうか? もちろん研究者としてのキャリアの中で研究対象を変えたり領域を広げたりすることもできるでしょう。ただ、そういった“自然な”拡張よりも、より大きくステップを広げることに依って、二つの円の重なり部分が小さい、より希少な人材となり、人から求められるようになります。今では私の本社への異動も、その後のキャリアを考え、より上位の、責任ある立場で私が活躍できるよう上司が考えてくれたものとして捉えています。



6. キャリアアップって何？

院生時代、頑張れば博士にはなれるが、教授になるにはまた別の素養が必要だ、と言われたことがあります。数学や理論物理の世界はまた別なのかもしれませんが、ライフサイエンスの世界で教授になれるくらいの業績を残すには、自分一人だけでいくら頑張っても無理がある、ということだと思います。企業内で生き残って研究室長になれる人が限られているのと、共通する理由があるようにも見えます。学生や部下を育てる力、マネジメント能力、方向性を定めクリアに伝える力、周りを巻き込んでヒトやカネ（リソース）を取ってくる力、等々がないと、こういったポジションには付けないのではないのでしょうか。しかもこれらは、ビジネスマンとしてリーダーになるために必要な素養とも共通しています。こういう人って、元々そういう性格で人望があり、だから自然とそういうことができて、選ばれているんだ、と思われる方もおられるかもしれません。でも私はそうではないと思います。これまで見てきた多くの先輩方は、意識して、あるいは必要に迫られて、努力の上そういった能力を身に付けてきたように見えます。

キャリアアップするために必要なのは、必ずしもある道を究める事だけではないのではないのでしょうか？身に付ける必要があるスキルがある程度共通しているのであれば、研究職にこだわらなくてもそれを達成する手段は色々あるはずです。アカデミックポジションが限られていて不安定だから学生が博士を目指さない、というのは大変残念な状況です。博士としての生き方は、実は多様なのですから。

7. さいごに

以上、ここまで博士号持ちであっても研究職にこだわらず、別の世界も見てみては、という思いで書いてきましたが、もちろん全ての方にお勧めできるわけではありません。アカデミアで真に新領域を切り開くような研究に携わりたい、薬の研究開発を通して社会に貢献したい、という方々もおられるでしょうし、研究が面白くてたまらないという方もおられるでしょう。性格的に今の職種以外は考えられないと思う方もおられるかもしれません。実は私も人と接するのがあまり得意ではなく、そのため一人でも仕事ができそうな理論系の研究職を選んできたという経緯があります。ただ、ヒトは変われます。というより変わらなければ多くの場合生き残れません。自分にはこれしかない、という状況より、選択肢を多く用意できれば余裕も出てきますし、世界が広がって楽しいと思います。皆さんが今後のキャリアを考える上で、本稿が少しでも参考になれば幸いです。



CBI 若手の会コラム担当通信

今回はダッソー・システムズ株式会社の高岡 雄司先生に「私のキャリアパス～研究者からビジネスマンへ～」のタイトルで寄稿して頂きました。ソリューション企業の側に移られてからという視点が非常にユニークで、大変興味深い記事となっています。

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い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 2023 年 9 月発行の第 3 号にて「若手の会キャリア第 6 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）

講演会 報告・予告

第 440 回 CBI 学会 講演会

CBI 学会ベンチャー連携企画第二回

「創薬・医療・ヘルスケア分野における VR の活用」

日時：2023 年 1 月 27 日（金）13:00 – 17:35

会場：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：黒野 昌邦（小野薬品工業㈱）、近田 千春（OpenEye, Cadence Molecular Sciences）、島田 裕三（富士通㈱）、
長谷川 清（中外製薬㈱）、緑川 淳（㈱ワールドフュージョン）、今枝 泰宏（㈱ Epigeneron）、
茂樺 薫（cBioinformatics ㈱）

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:05 開会の挨拶
- (2) 13:05 - 13:45 「精神科医療の課題を解決する VR を活用した取り組み」
外川 大希（株式会社ジョリーグッド）
- (3) 13:45 - 14:25 “The use of VR/AR to accelerate in silico drug discovery”
Keita Funakawa（Nanome, Inc.）
- (4) 14:35 - 15:15 「歯科 DX の現在と未来」
宇野澤 元春（株式会社 Dental Prediction）
- (5) 15:15 - 15:55 「仮想現実（VR）技術を用いたリハビリテーション
『mediVR カグラガイド下治療』の最新知見」
村川 雄一郎（株式会社 mediVR）
- (6) 15:55 - 16:35 「心を支える VR デジタルソリューション」
松村 雅代（株式会社 BiPSEE）
- (7) 16:40 - 17:30 パネルディスカッション
- (8) 17:30 - 17:35 閉会の挨拶

開催報告：

CBI 学会は創薬/AI ベンチャー企業と多様な領域で活躍される参加者のみなさまが連携する機会として、ベンチャー企業主体の継続的な講演会を企画しています。第二回は、創薬・医療・ヘルスケア分野で実用化が進んでいる VR 技術に注目し、VR・AI 技術を治療手法、リハビリテーションに活用し提供する企業、遠隔教育・支援などのコミュニケーションツールとして活用している企業の 5 名の講師から、VR 技術の活用事例や課題、そして将来展望についてご講演いただきました。

外川大希先生（株式会社ジョリーグッド）は、統合失調症患者さんの社会復帰、自己実現に重要な「リカバリー」には薬物療法に加えて支援施設におけるソーシャルトレーニング（SST）が求められており、SST をサポートする VR の提供についてご講演いただきました。また、同社での、VR による大規模かつ効率的な医療看護領域の教育へのインパクトの大きな取り組みについてもお紹介いただきました。

Keita Funakawa 先生（Nanome, Inc.）は、創薬研究における XR（Augmented, Virtual and Mixed Reality）技術の活用について欧米製薬会社を事例にご紹介いただきました。XR 技術の活用は没入型の 3 次元描画の恩恵による新たなアイデアの創出のみならず、創薬分子設計プログラムを仮想空間上で再現することによる新たな共同研究環境を実現しているとのことでした。

宇野澤元春先生（株式会社 Dental Prediction）は、歯科界の様々な課題に対してデジタル技術を用いた数々の取り組みについてご紹介いただきました。患者の CT 画像から作成した 3D モデルを基にした VR コンテンツを提

供し、治療シミュレーションを実施、さらにデジタル模型を使った実習を組み合わせ、歯科医師の治療技術の向上の取り組みを紹介されました。国内外の大学と連携し、5G を活用した遠隔医療の実証実験も進めているとのこと。

村川雄一郎先生（株式会社 mediVR）からは、VR リハビリテーション医療機器「カグラ」についてご紹介がありました。小児麻痺、股関節炎、脳出血、パーキンソン病、慢性疼痛、ハンチントン病などの具体的なケーススタディが紹介されました。「カグラ」は、ゲーム感覚で脳の潜在的な記憶を呼び起こすようにプログラムがされており、有効性が立証されています。また、利用中での疲労度を感じる患者さんは 0.5% と少なく、安全性の面でも保証されています。

松村雅代先生（株式会社 BiPSEE）は、心療内科の分野で VR を用いたデジタル療法の開発を行なわれており、その有効性についてご紹介いただきました。具体的には、VR を活用することで子供の歯科治療時の恐怖感や痛みを低減させる事ができたり、薬物療法では対応できないようなうつ病治療のケースにおいても効果が出ているとのことでした。また、集団精神療法における医療スタッフの人材不足という問題に対してメタバースを活用することの可能性についてもご紹介いただきました。

パネルディスカッションでは、①未来の医療・創薬現場、社会の XR の活用、② VR 空間だからできること、③医療業界以外で VR 技術を活かすコンテンツとは、④現時点での VR の問題点や課題について議論いただきました。VR 利用において、その没入感を利用して、教育効果はもとより、薬剤を超える治療効果や、未病への挑戦、パーソナライズド・メディシンをサポートするコミュニケーションツールとして、更なる可能性と明るい展望を印象付けるものとなりました。

（世話人一同）



外川 大希 先生



Keita Funakawa 先生



宇野澤 元春 先生



村川 雄一郎 先生



松村 雅代 先生

第 441 回 CBI 学会 講演会

「スマートシティにおけるライフサイエンス業態の役割と目指す姿」

日時：2023 年 2 月 3 日（金）13:00 – 17:30

会場：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：坂田 恒昭（大阪大学）、市川 治（住友ファーマ）

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 世話人挨拶
- (2) 13:05 - 13:50 「PHR で実現する本人主体の健康・医療データ活用社会」
石見 拓（京都大学）
- (3) 13:50 - 14:35 「吹田健都・JST「共創の場」としての産・学・官の実質的融合連携」
望月 直樹（国立循環器病研究センター研究所）

- (4) 14:35 - 15:20 「大阪のスマートヘルスシティ計画 ～ 2025 年万博に向け
世界一の健康先進まちづくりが始動する！～」
坪田 友巳（大阪府スマートシティ戦略部）
- (5) 15:35 - 16:20 「大阪大学ライフデザインイノベーションの取り組みついて、
さらにうめきた II 期、大阪関西万博へ向けて」
下條 真司（大阪大学）
- (6) 16:20 - 17:05 「バイオコミュニティ関西 (BiocK) ～「集積」から「連携」へ～」
坂田 恒昭（大阪大学）
- (7) 17:05 - 17:30 総合討論

開催報告：

2022 年 2 月 3 日にオンライン配信（Zoom ウェビナー）にて開催した第 441 回 CBI 学会研究講演会について報告する。「スマートシティにおけるライフサイエンス業態の役割と目指す姿」と題し、計 5 名の講師の先生にご講演いただいた。

石見拓先生（京都大学）からは、パーソナルレコード（PHR）への期待と活用に関してご講演いただいた。生涯にわたる連続的なデータを、特に本人の意志の下で活用する仕組みが重要である点が強調された。心肺蘇生に関する突然死を減らすデータ活用の取り組み事例や、複数の PHR 企業が一定のルールの下で標準化されることの必要性が提起された。

望月直樹先生（国立循環器病研究センター研究所）からは、吹田健都・JST「共創の場」における産・学・官連携のご紹介があった。世界モデルとなる自律型成長型を目指していること、データプラットフォームを共創の場で企業も利用できることなどに特徴がある。

坪田知巳先生（大阪府）のご講演では、「スーパーシティ型国家戦略特別区域」としての大阪の取り組みについて、ご説明された。大阪府の特徴として、都市部以外の人口減少する市町村部を含めて地方創生を進めている点、規制改革を推進している点、国家戦略として都市 OS である ORDEN を構築して行政のリーダーシップを進めている点などが示された。

下條真司先生（大阪大学）は、スマートシティ構想において、データ連携プラットフォームを構築し、安心・安全にデータを流通していくことの重要性に言及された。個人情報活用に関しては、ヘルスケア情報までを米国 GAFA などが独占する形は昨今では認められない風潮であり、欧州 GDPR のような体制も活用しにくいので、日本として適切な形を考える必要性を課題提起された。

坂田恒昭先生（大阪大学）からは、バイオコミュニティ関西 (BiocK) についてご紹介があった。バイオコミュニティの創生を目的としており、特に産業界を巻き込んでいる点に強みがある。ヘルスケア等の多くの分科会が存在しており、国内外のネットワーク形成とバイオベンチャー創生に繋がることが期待される。

各業態が、ライフサイエンスに重点を置いたスマートシティや産官学コミュニティにどういった役割を担うかを考える機会となりました。講演いただいた先生方、ご助力いただいた方々に、この場を借りて深く御礼申し上げます。

（世話人一同）



石見 拓 先生



望月 直樹 先生



坪田 友巳 先生



下條 真司 先生



坂田 恒昭 先生

第 442 回 CBI 学会 講演会

「AI・計算科学を活用した次世代創薬ワークフロー ～メディシナルケミストの役割～」

日時： 2023 年 2 月 17 日（金）13:00 - 17:25

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㈱）、門 祐示（Meiji Seika ファルマ㈱）、嶋田 朋嘉（第一三共㈱）

谷村 直樹（みずほリサーチ & テクノロジーズ㈱）、中村 信二（武田薬品工業㈱）、増田 友秀（東レ㈱）

プログラム

- (1) 13:00 - 13:10 はじめに
- (2) 13:10 - 13:55 「AI・データ駆動型創薬プラットフォームの構築～メドケムに活用されるための取り組み～」
瀬尾 竜志（アステラス製薬株式会社）
- (3) 13:55 - 14:40 「武田薬品工業の創薬化学研究における AI の活用」
高木 輝文（武田薬品工業株式会社）
- (4) 14:50 - 15:35 「Adapting a Digital Chemistry Strategy for Drug Discovery」
高橋 秀典（Schrödinger Inc.）
- (5) 15:35 - 16:20 「AI、ロボティクス、自動化の時代におけるメドケムの進化」
藤 秀義（ケモインフォ株式会社）
- (6) 16:30 - 17:20 パネルディスカッション
- (7) 17:20 - 17:25 おわりに

開催報告：

2023 年 2 月 17 日（金）にオンライン開催した第 442 回 CBI 学会講演会では、「AI・計算科学を活用した次世代創薬ワークフロー ～メディシナルケミストの役割～」と題し、国内外の第一線で活躍されている 4 名の先生方をお招きし、AI や計算科学、あるいは自動化技術を取り入れた、現実的な創薬ワークフローについてご講演いただいた。

瀬尾竜志先生（アステラス製薬株式会社）からは、メドケムである先生自らが構築されている AI・データ駆動型創薬プラットフォームについてご講演いただいた。はじめに、人・AI・ロボットが統合されたプラットフォームの概要についてご紹介いただき、次いで、メドケムに活用されるための仕組み・ポイントについて、ご経験をもとに具体的な説明をいただいた。ヒット化合物から医薬品候補化合物取得までの期間が最大で 70% 短縮するなどの成果も上がっているとのことで、多くの参加者からの関心が寄せられた。

引き続き高木輝文先生（武田薬品工業株式会社）から、AI ツールを活用した社内創薬研究について、実例を交えてご講演いただいた。はじめに、社内データを活用した ADMET 予測モデルおよびメディシナルケミストも利用可能な環境構築についてご紹介いただいた。次に、生成 AI による効率的なデノボデザイン、Gini ツールを用いた MD トラジェクトリ解析について、それぞれご紹介いただいた。

高橋秀典先生（Schrödinger Inc.）からは、計算科学を活用した創薬研究が発展してきた経緯や従来の研究手法との違いなどを俯瞰いただき、シュレーディンガー社での取り組みについて紹介いただいた。また、同社での具体的な事例として、MALT1、Tyk2 阻害剤研究をあげ、短期間で臨床試験候補化合物の創出に至った例を示していただいた。予測構造に基づいた創薬研究も既に始めており、今後さらに応用範囲が広がることが期待される。

最後に藤秀義先生（ケモインフォ株式会社）から、まず Generative AI について最近の技術開発の概要をご説明いただいた。そのうえで、メドケムに関する技術として、先生が Senior External Advisor を務められる Iktos 社の Makya、Spaya について、これらの具体的な適用事例を併せながらご紹介いただいた。また、自動合成に関する Iktos 社の技術として Ilaka についてもご紹介いただいた。

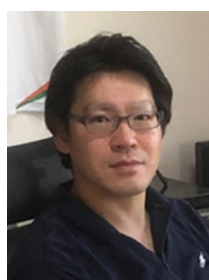
ご講演後のパネルディスカッションでは、次世代の創薬ワークフローや人材育成、コミュニケーション、メディシナルケミストの役割などについて深く議論いただいた。近年の AI 創薬や計算創薬の大幅な進展により、創薬研究の進め方やワークフローが大きく変貌しつつある中で、メディシナルケミストの知識や経験に基づく視点をどのようにワークフローに加え、またどのように役割分担してゆくか、さらにはメディシナルケミストの将来像についても議論する貴重な機会となった。

当日は 3 百名以上の方にご参加いただき大盛況のうち終了した。ご講演いただいた講師の先生方、アンケートにご協力、ご参加いただいた皆様、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)



瀬尾 竜志 先生



高木 輝文 先生



高橋 秀典 先生



藤 秀義 先生

第 443 回 CBI 学会 講演会

「創薬を加速する巨大ケミカルスペース」

日時： 2023 年 3 月 17 日 (金) 13:00 – 17:50

場所： オンライン配信 (Zoom ウェビナー使用)

世話人： 高橋 瑞稀 (第一三共 RD ノバーレ(株))、遠藤 真弓 (大正製薬(株))、大槻 幸恵 (大鵬薬品工業(株))、
大原 康徳 (日本たばこ産業(株))、奥田 歩 (興和(株))、狩野 敦 (株)モルシス)、佐藤 太郎 (杏林製薬(株))、
村崎 広太 (田辺三菱製薬(株))

プログラム

- (1) 13:00 - 13:10 はじめに
- (2) 13:10 - 13:50 「超大規模バーチャルスクリーニングを活用した創薬研究の実例」
崎山 則征 (アステラス製薬株式会社)
- (3) 13:50 - 14:30 「日産化学における DNA-encoded Library 技術構築」
丹羽 雅俊 (日産化学株式会社)
- (4) 14:45 - 15:25 「AI 創薬プラットフォーム LIGHTHOUSE による創薬革命」
中山 敬一 (九州大学)
- (5) 15:25 - 16:05 「Beyond the Enumerable:
Success Stories from Ultra-Large Chemical Space Navigation」
Marcus Gastreich (BioSolveIT GmbH)
- (6) 16:20 - 17:00 「オープンイノベーションと DX が引き起こす化合物ライブラリ戦略の進化」
狩野 弘樹 (田辺三菱製薬株式会社)
- (7) 17:00 - 17:40 パネルディスカッション
- (8) 17:40 - 17:50 まとめ

開催報告：

近年の実験的・計算科学的手法の発展は目覚ましく、従来では到底考えられなかった「超巨大ケミカルスペース」、つまり兆を超える桁の数の化合物群を取り扱い、その中から目的に合致する分子を網羅的に探索することが可能となりつつあります。今回の研究講演会では、実験的手法、計算科学的手法の双方から従来とは大きく異なる桁の化合物を扱う手法としての、DNA-encoded Library(DEL)、AI の活用を含めたバーチャルスクリーニング、超大規模の仮想ライブラリの構築などの新規技術を開発・活用されている先生方より、最先端の研究事例をご紹介いただきました。また、事前アンケートの集計結果を参考にしたパネルディスカッションも企画いたしました。

はじめに、崎山則征先生から、巨大ケミカルスペースに対応した計算科学的手法に相当する「超巨大バーチャルスクリーニング (ULVS)」における課題とその課題を克服するための既存手法の概要と技術検証の結果についてご講演いただきました。アステラス製薬独自で開発した現実的なタイムスケール・コストで実現可能な ULVS の構築内容、実際の創薬プロジェクトにてヒット化合物を取得した事例、さらには、フラグメントスクリーニングや X 線結晶構造解析の Wet 技術と ULVS の Dry 技術による一連のプラットフォーム構築により、化合物との複合体構造が公知でない蛋白質を標的とした場合も含めた初期創薬研究における成功確率向上・加速化を図るといった取り組みについてご紹介いただきました。

丹羽雅俊先生からは、DEL の基本原理・その特徴から丁寧に解説いただくとともに、複数のライブラリ構築のご経験をもつ日産化学独自のライブラリ設計、タグとしての DNA 部位の設計についてご説明いただきました。ライブラリ自体の質の担保に加え、光反応性基の導入などの評価段階での工夫により、確実なヒット化合物の取得につながっている例、さらには細胞を用いた系において細胞表面の標的についても特異的なヒット化合物が得られている例をご紹介いただきました。

中山敬一先生からは、タンパク質や化学物質の 3 次元構造情報を用いず、1 次元情報に基づいて治療薬候補を高速に見つけ出すことができる独自開発された深層学習アプローチ「LIGHTHOUSE」についてご講演いただきました。LIGHTHOUSE はドッキングシミュレーションとほぼ同等の精度を示し、計算速度は数千倍高速とのことでした。LIGHTHOUSE によってがん、細菌感染症、COVID-19 などに対する治療薬候補を発見された事例、さらに、リバーズ LIGHTHOUSE として特定の標的化合物から結合タンパク質探索や pathway enrichment 解析された事例など、創薬研究を加速する Dry 技術 /Wet 技術の融合した取り組みについてご紹介いただきました。

Marcus Gasterich 先生には、 10^{12} を超える巨大ケミカルスペースの中から高速スクリーニングを行う技術について多くの事例を交えてご講演いただきました。リガンドベースによる化合物検索では、BioSolveIT 社の提供する infiniSee を用いて一般的な PC を用いて購入または合成可能性の高い構造を高速に提案できることを説明されました。受容体構造ベースによるスクリーニングでは、Chemical Space Docking を利用して、親和性かつ合成可能性の高い構造が提案できています。紹介した事例から、複数のケミカルスペース内の分子の重複は少なく、複数かつより大きなケミカルスペースを使用した方がより有望な化合物が見つかる可能性が高いことが示唆されています。これらの手法は“green computing”を目指して、計算負荷を軽減した開発が進められています。

狩野弘樹先生からは、スクリーニングに用いることのできる化合物ライブラリが拡張している一方で、大量スクリーニングが困難な創薬標的が増えている、という相反する状況のギャップを克服するため、現在取り組んでおられる Elite Library についてご紹介いただきました。Elite Library の選抜概念、保有ライブラリの定期メンテナンスなど具体的な運用をご紹介いただいたことで、同じような状況に直面している参加者から多くの質問をいただき、活発な Q&A セッションとなりました。

パネルディスカッションでは、事前アンケートから見受けられた今後への期待に対し、各先生方から多くのコメントをいただきました。難標的に対する活性化化合物取得に向けて、取り扱う化合物数の桁を大きく変えることの意義、相補的に活用可能な実験的手法や各種計算科学的手法といった多くのオプションがあり目的に応じて組み合わせ使い分ける必要があること、といった、実際の運用にも大いに参考になる議論がなされました。

いずれの講演においても、巨大ケミカルスペースを取り扱う新規技術を実際の創薬に活用されている事例を多くご紹介いただき、参加者の皆様に巨大ケミカルスペースが創薬に与えるインパクトを実感いただけたのではないかと思います。お忙しい中ご講演をお引き受けいただきました先生方、また事前アンケートにご協力いただきました皆様に、世話人一同この場を借りて厚く御礼申し上げます。

(世話人一同)



中山 敬一 先生



Marcus Gastreich 先生



狩野 弘樹 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

第 446 回 CBI 学会講演会

「In vitro-in vivo extrapolation (IVIVE) の成功への鍵：

best な in vitro 実験系・評価法の確立へ向けて」

日程：2023 年 6 月 14 日（水）13：00 – 17：50

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：杉山 雄一（城西国際大学薬学部）、前田 和哉（北里大学薬学部）

第 447 回 CBI 学会講演会

「創薬研究を加速する計算科学の新潮流 ～量子化学、分子動力学、機械学習の融合～」

日程：2023 年 7 月 28 日（金）10:30 - 16:50

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)）、門 祐示（Meiji Seika ファルマ(株)）、芹沢 貴之（第一三共(株)）、
谷村 直樹（みずほリサーチ & テクノロジー(株)）、中村 信二（武田薬品工業(株)）、増田 友秀（東レ(株)）

研究会報告

計算 ADMET 研究会主査就任の挨拶

明治薬科大学医療分子解析学研究室

植沢 芳広

この度、計算 ADMET 研究会（旧・計算毒性学研究会）の主査を拝命いたしました、植沢芳広でございます。主査就任にあたりご挨拶させていただきます。

計算 ADMET 研究会は前主査の湯田浩太郎先生によって 2014 年に計算毒性学研究会として設立されました。当時、日本においては計算毒性学に関する認知度が極めて低い状況でしたが、多くの皆様のご協力のもと、本研究会は活発な議論の場となって参りました。一方、体内動態と毒性に対する包括的な理解は、毒性発現メカニズムに対する理解とそれに基づく効率的な医薬品をはじめとした機能性分子の安全性評価のために重要です。そこで、2023 年 1 月には、毒性とともに化学物質の体内動態に関する知見を包括的に情報共有する場として、計算毒性学研究会は計算 ADMET 研究会へと改称され、現在に至ります。新規化学物質の開発における安全性や環境毒性の評価など、人々の生活に直結する問題と深く関わっていることから、本研究領域は今後ますます重要性を増していくと考えられます。

一般に ADMET の各要素は、単一のターゲットタンパク質等に依存するシンプルな系ではなく、多様な要素からなる複雑なプロセスによって構成されています。一方で、人工知能技術をはじめとする計算科学の進歩はまさに日進月歩であり、従来は困難であった複雑な体内動態・毒性に関する予測の可能性はますます拡がりを見せています。

このような背景から、ADMET 研究会では多様な分野における多くの研究成果を共有していきたいと考えております。多様な研究者が参加できるような環境を作り出すことによって、計算 ADMET 研究の進捗に寄与することを目指します。広範な研究領域の連携を通じて、本研究会が更に発展していくことを願っております。今後ともご指導、ご支援を賜りますようお願い申し上げます。

計算 ADMET 研究会構成委員：

主査	植沢 芳広	（明治薬科大学）
副主査	水間 俊	（帝京平成大学薬学部）
専門委員	湯田 浩太郎	（インシリコデータ）
幹事	石田 誠一	（崇城大学生物生命学部）
	金子 弘昌	（明治大学理工学部）
	狩野 敦	（株式会社モルシス）
	坂 幹樹	（東京大学医学部）
	曾根 秀子	（横浜薬科大学）
	永堀 博久	（住友化学株式会社）
	根本 直	（メタボリック・プロファイリング研究会）
	長谷川 清	（中外製薬株式会社）
	古田 一匡	（富士通株式会社）
	結城 伸哉	（株式会社 Elix）

委員会報告

創薬研究会運営委員会

第 58 回創薬研究会運営委員会

日時：2023 年 3 月 7 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) 今後の創薬研究会講演会開催予定について
- (2) グループの前回討議内容のフィードバック
＜ブレイクアウトルーム＞
- (3) グループで企画討議

関西部会運営委員会

日時：2023 年 3 月 2 日 (木) 10:15 - 12:15

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) 2023 年夏の講演会について
- (3) 2024 年 1 月頃の講演会について
- (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 89 回執行部会

日時：2023 年 2 月 24 日 (金) 18:00 - 18:50

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) 年会担当：大会ウェブサイトについて
- (2) 会計、事務局担当：特になし
- (3) 渉外担当：協賛・配信等の報告
- (4) 学会誌担当：3 月 1 日に 2023 年第 1 号の学会誌発刊予定
- (5) 出版事業担当：分子動力学に関する出版物の準備について
- (6) 編集担当：特になし
- (7) 新規事業担当：人材バンクの進捗状況、研究機構下の科研費申請機関の準備、研究機構の規約案文作成の準備について
- (8) 地域担当：関西部会の次回・次々回の講演会予定
- (9) 若手の会：第 8 回若手の会講演会開催の報告、次回の講演会開催の予定
- (10) 研究推進委員会：分子ロボティクス研究会新設、計算 ADMET 研究会主査交代について
- (11) 創薬研究会：若手取り込みについて、インターシップの可能性のヒヤリング、Google Workspace の利用について
- (12) ベンチャー連携：第 2 回ベンチャー連携講演会報告、第 3 回ベンチャー連携講演会の企画について
- (13) CBI 研究機構：科研費申請機関の申請の準備について
- (14) 事務局担当理事：2023 年度 CBI 学会賞・CBI 学会若手奨励賞募集開始

第 90 回執行部会

日時：2023 年 3 月 23 日 (木) 18:00 - 19:00

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) 年会担当：次回実行委員会開催予定について
- (2) 会計、事務局担当：2022 年度会計を取りまとめ中、次回報告予定
- (3) 渉外担当：特になし
- (4) 学会誌担当：CBI 学会誌第 11 巻 第 1 号公開の報告
- (5) 出版事業担当：特になし
- (6) 編集担当：審査中の論文の報告、次期編集委員長次々期編集委員長について、PubMed の index 検索ができるようになるための調査準備について
- (7) 新規事業担当：人材バンクについての進捗報告、科研費の申請機関承認に向けての準備について
- (8) 地域担当：関西西部会の議事録の共有
- (9) 若手の会：次回の講演会企画について、CBI 学会の運営・コミュニケーション効率化へのメンバーの参画
- (10) 研究推進委員会：4 月からの分子ロボティクス研究会の発足、計算 ADMET 研究会の主査の交代について
- (11) 創薬研究会：インターシップのフィジビリティの集計（次回報告）、講演会の開催報告、次回講演会予定、ベンチャー連携企画について、オンサイトでのハンズオンについて
- (12) ベンチャー連携：今後の企画について
- (13) CBI 研究機構：科研費を受け取れる機関へ向けての準備について
- (14) 事務局担当理事：顧問設立（案）について、評議員会 6 月開催のお知らせ
- (15) 執行部会での議事録作成の効率化について

第 91 回執行部会

日時：2023 年 4 月 27 日 (木) 18:00 - 18:40

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：HP 公開 <https://www.cbi-society.jp/annual-meetings/2023/>
大会準備進捗状況報告、大会の新企画、ポスター発表口頭発表募集開始予定について
- (2) 会計、事務局担当：次回報告予定
- (3) 渉外担当：協賛・配信等の報告
- (4) 学会誌担当：CBI 学会誌第 11 巻 第 2 号準備状況の報告
- (5) 出版事業担当：特になし
- (6) 編集担当：審査中の論文の報告
- (7) 新規事業担当：特になし
- (8) 地域担当：企画協力の依頼
- (9) 若手の会：第 9 回 CBI 若手の会講演会開催予定について
- (10) 研究推進委員会：分子ロボティクス研究会の発足、計算 ADMET 研究会の主査の交代について
- (11) 創薬研究会：CBI2023 大会でケモインフォマティクスのハンズオンを開催
- (12) ベンチャー連携：今後の企画についての進捗状況の報告
- (13) CBI 研究機構：科研費を受け取れる機関へ向けての準備について
- (14) 事務局担当理事：新規法人会員入会の報告

CBI 研究機構

第 24 回運営会議

日時：2023 年 2 月 27 日 (月) 8:00 - 8:50

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) 科研費申請に関わる研究機関指定申請に関して

(2) 研究所の進捗報告

- ①先端領域 ELSI 研究所：3 月 10 日に分子ロボット倫理研究会の開催を予定
- ②量子構造生物科学研究所：3 月 22 日に中性子構造生物学研究会の開催を予定
- ③次世代モダリティ研究所：第 5 回次世代モダリティセミナー～VHH 抗体医薬品の可能性～開催報告

第 25 回運営会議

日時：2023 年 3 月 20 日（月）8:00 - 8:35

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) 科研費申請に関わる研究機関指定申請に関して
- (2) 研究所の進捗報告
 - ①先端領域 ELSI 研究所：3 月 10 日の分子ロボット倫理研究会開催報告
 - ②量子構造生物科学研究所：3 月 22 日に中性子構造生物学研究会の開催を予定
 - ③次世代モダリティ研究所：3 月 17 日（金）の次世代モダリティ研究所の勉強会開催報告

第 26 回運営会議

日時：2023 年 4 月 21 日（金）8:00 - 8:40

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) 科研費申請に関わる研究機関指定申請に関して
- (2) 各研究所の 2023 年度予算案について
- (3) 研究に関わる試薬購入について
- (4) 研究所の進捗報告
 - ①先端領域 ELSI 研究所：会員の新規入会の報告
 - ②量子構造生物科学研究所：5 月 27 日開催予定の学術会議シンポジウム「基礎科学が導く SDGs 達成への道～結晶&生命&技術革新～」に関しての紹介、9 月 25 日～29 日に静岡で開催される ICCP450 Meeting に研究所として参加を予定
 - ③次世代モダリティ研究所：5 月 26 日第 6 回次世代モダリティセミナー「ペプチド医薬品の進展」を開催予定

2023 年大会プログラム委員会**第 2 回 2023 年大会プログラム委員会**

日時：2023 年 3 月 31 日（金）10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

- 報告：
- (1) 口頭発表とポスター発表のキーワードについて
 - (2) フォーカストセッション（FS）について
 - (3) 口頭発表とフォーカストセッションの会場について
 - (4) ミート・ザ・レジェンドの進捗
 - (5) 有料チュートリアル企画について
 - (6) データソンについて
 - (7) トラベルアワードについて
 - (8) 今後のスケジュール

協議事項：

- (1) カテゴリー・キーワード設定について
- (2) 口頭発表とポスター発表の募集要項について
- (3) フォーカストセッションの公募案について
- (4) 口頭・ポスター発表募集期間について
- (5) 有料チュートリアルについて
- (6) コーヒールームについて

2023 年大会実行委員会

第 2 回 2023 年大会実行委員会

日時：2023 年 2 月 24 日（金）15:00 - 16:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 全体

- (2) プログラム委員会：フォーカストセッションの公募について、口頭発表ポスター発表について、企画の進捗報告、トラベルアワードについて
- (3) 会計：予算案
- (4) 大会システム：進捗状況報告
- (5) 広報：大会 Web サイト準備、キービジュアル作成、SNS の活用
- (6) 配信：配信業者の選定
- (7) 会場：会場キャンセル期限、予約内容の確認、1 階展示ホールレイアウトの検討、コーヒーコーナーについて
- (8) 総務、事務局より報告
- (9) 他団体への協賛依頼：準備中

第 3 回 2023 年大会実行委員会

日時：2023 年 3 月 24 日（金）14:00 - 15:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 全体

- (2) プログラム委員会：フォーカストセッションの公募募集要項の準備、口頭発表 / ポスター発表募集要項の準備、企画の進捗報告、チュートリアル新企画アンケート分析、データソン企画について、トラベルアワードの公募
- (3) 会計：予算案
- (4) 大会システム：進捗状況報告
- (5) 広報：大会 Web サイト準備、大会ポスターの作成、スポンサードセッション / シンポジウムの PR、SNS の活用について
- (6) 配信：配信業者の選定について
- (7) 会場：会場キャンセル期限と予約内容の確認、1 階展示ホールレイアウトの検討、コーヒーコーナーについて
- (8) 総務、事務局より出展申込みの状況を報告
- (9) 他団体への協賛依頼：準備中

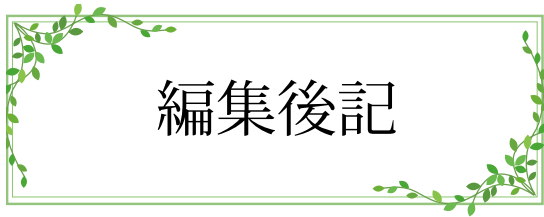
第 4 回 2023 年大会実行委員会

日時：2023 年 4 月 17 日（月）9:00 - 10:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 全体：プログラム企画・概要、日本バイオインフォマティクス学会（JSBi）との連携の企画、総会開催枠、ウェルカムレセプションについて、講師昼食会について

- (2) プログラム委員会：フォーカストセッション、口頭発表 / ポスター発表募集要項の準備、企画の進捗報告、チュートリアル新企画、データソン企画について、トラベルアワードの募集要項確定
- (3) 会計：予算案、予算の執行について、参加費・出展料の確定
- (4) 大会システム：大会 Web サイト、大会オンライン開催ページの準備状況、今後のスケジュールについて
- (5) 広報：大会 Web サイト準備、大会ポスターの作成、SNS の活用について
- (6) 配信：大ホールでのライブストリーミング配信、配信業者の見直し
- (7) 会場：講演会場、チュートリアル会場、ポスター発表・ブース展示会場の開催枠・ネット回線・レイアウトの確認
- (8) 総務、事務局より出展申込みの状況を報告
- (9) 他団体への協賛依頼：準備中



編集後記

近年の AI 技術の発達が目覚ましく、2045 年と予測されていた Singularity の到来も早まるかもしれませんね。

既に ChatGPT 等の技術をどう利用す(しない)べきかの議論も活発になっていますが、今号の「CBI ジャーナル便り」において、大阪大学の高木先生が CBIJ に投稿された AI に関する意見論文について紹介されています。ライフサイエンスの分野で AI に何ができるか、研究者はどう活用すべきか、また今後の展望などについても議論されていますので、是非原著をご覧くださいと思います。

先生が AI の事を「それら」ではなく、「彼女ら」と呼んでいる理由については、別途詳しくお話を伺いたいところです。(Y.T.)

CBI 学会誌 第 11 巻 第 2 号

2023 年 6 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 塩塚 真理 牛尾 律子 岸 早絵 高澤 恵

小宮山 直美 藤田 真澄

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。

