

CBI学会誌



第 12 卷第 4 号

2024 年 12 月 15 日発行

研究の温もり

飯島 洋

日本大学薬学部薬学研究所
CBI 研究機構

自分の研究の関係で、たまたま、赤血球に興味を持った。まずはネットの検索である。Wikipedia はとっかかりとして多くの場合とても役に立つが、書いた人のバイアスがあったり、知りたい部分には触れられていない場合や、時には誤りと思われる記述もある。今回の場合、欲しい内容は見つからなかったが、引用元として 1991 年に出版された水上茂樹著「赤血球の生化学第二版（東大出版）」が挙げられていた。図書館を調べると幸にして在架があった。題名どりの本で、赤血球の基本的な事柄がさらに引用論文付きで書かれていた。内容も素晴らしかったが、一番新鮮だったのは、研究者の哲学と経験、「温もり」が文章を通じて伝わってきたことであった。

私は定年退職した老兵で、この感覚は久しぶりに感じた。若い頃の自分が研究室の指導教員や研究室の雰囲気から得た感覚と似ている。そういえば、実験化学講座や生化学実験化学講座といった書籍もあった。実験のコツや気をつけなくてはいけない点など経験が織り込まれていてとても視野が広がったし、著者に親近感を覚えた。昔話ばかりで恐縮だが、私が初めて CBI の研究会に参加した日のことも思い出す。場所は思い出せないが、どこかの会議室に、製薬や化学分野の中堅研究員の方々が集まって、分子構造情報計算（具体的には、すでに実用の領域にあった多変量解析ベースの定量的構造活性相関、量子化学計算、分子力学、コンピューターグラフィックスやタンパク質の立体構造解析、配列データベース）という新しい科学について勉強をされていた。参加者全員、社命ではなく、自分自身に取り組むために参加していること、それをファシリテートしていた神沼先生が印象的だった。CBI を通じて多くの先輩から経験を分けていただいた。先輩の後姿、息遣い、鍵の一言、を感じて得るものは身に付く。

コロナのお陰でリモートコミュニケーション基盤が数年で構築されたので、地理的、時間的にも、交流はしやすくなった一面もあるので、学会発表、論文などの「正式」で「正確」な情報交換だけでなく、飲みニケーションも活用して、感覚で人間的な温もり交流の場としての CBI にも期待したい。

目次

(1) 巻頭言 「研究の温もり」	
飯島 洋（日本大学薬学部薬学研究所 / CBI 研究機構）	1
(2) CBI 学会 2024 年大会特集 <前編 - 10 月 28 日・29 日・30 日午前 報告>	3
大会実行委員長 「CBI 学会 2024 年大会を終えて」	
夏目 やよい（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）	4
大会長講演 「多面的モデリングの基礎としてのデータ統合 - AI 創薬に向けて」	
水口 賢司（大阪大学 蛋白質研究所）	5
プレナリー講演 「デジタル革命と創薬：進化する企業戦略」	6
招待講演	7
記念講演 若手奨励賞特集	10
特別講演	12
公開シンポジウム	13
スポンサーシンポジウム	15
フォーカストセッション	18
チュートリアル	20
口頭発表	24
口頭発表賞・ポスター賞	29
CBI2024 年大会 各会場の様子	32
(4) ホットトピックス	
「深層生成モデルを用いた分子動力学シミュレーションの高速化」	
中田 柊也（神戸大学大学院 システム情報学研究所）	33
(5) CBI 研究機構便り	35
(6) 若手の会コラム第 12 回 シリーズ企画「若手の会キャリア（第 9 回）」	
「私のキャリアパス紹介」～日本とドイツ、様々な出会いを通して広がった研究の視点～	
市川 彩花（大阪大学 蛋白質研究所）	40
(7) 講演会報告・予告	45
(8) 委員会開催報告	48
(9) 編集後記	50

※大会後編（10 月 30 日午後・31 日 報告）は、第 13 巻 第 1 号に掲載いたします。



CBI 学会 2024 年大会

多様性を生み出すデータベースとモデリング研究

会期：2024 年 10 月 28 日 (月) ~ 10 月 31 日 (木)

会場：タワーホール船堀 (東京都江戸川区船堀 4-1-1)

オーガナイザー：

大会長 水口 賢司 (大阪大学 蛋白質研究所)

実行委員長 夏目 やよい (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)

プログラム委員長 関嶋 政和 (東京科学大学)

大会報告 – 前編 –

10 月 28 日・29 日・30 日 午前

※ 10 月 30 日午後・31 日の報告は、
後編 (第 13 巻 第 1 号 : 2025 年 3 月 1 日発行) に掲載いたします。

CBI 学会 2024 年大会を終えて

2024 年大会 大会実行委員長

夏目 やよい (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)

CBI 学会 2024 年大会では、大会テーマ「多様性を生み出すデータベースとモデリング研究」に合わせた新たな試みを行いました。CBI 学会自体、化学、生物学、情報計算学を基礎とする幅広い学術分野を対象とした多様性を有しております。その一方で、これまで医薬品の開発研究という目的を共有した研究者が集う場として機能してきた面が強いと思われれます。

2024 年大会では、アカデミアと企業という、異なる性質を持ちながらも互いに補完的な関係にあるものについて、多様性が浮かび上がるようなセッションを企画しました。大会長講演、プレナリー講演とそれに続く総合討論では、アカデミア、創薬企業、IT 企業それぞれの立場でどのような活動がなされているか、どのような問題意識が持たれているかといった情報共有を通して、日本が今後当該分野で存在感を示し続けるために何が重要なかが見えてくる刺激的なセッションとなりました。

また、CBI 学会の関心領域を共有しながら異なる目的を持つトピックスにスポットライトを当てました。今後より一層情報計算学の導入が進むと考えられる健康科学から、多様性を生み出す源流として本大会で注目したデータベースシステムやプログラミング言語、AI 研究の最先端を走る LLM、知的好奇心をくすぐる考古学におけるコンピュータサイエンスの導入まで、研究分野や専門を問わずお楽しみいただけるようなコンテンツを心掛けました。CBI 学会の従来の良さ、強みを維持しつつ、新鮮な話題に触れる機会を設けることができたのではないかと考えております。

多様性とは、違いを知り、互いに尊重・認め合うこと。知識として得た情報を理解へと高める必要があり、そのためには会話を通じた交流が重要です。参加者の交流の場を設けるべく、休憩時間を長めに設定し、実験的試みとして「サクサクトーーーク！」を企画しました。前年大会で好評だったカフェ船堀は Elix Café として一新、参加者の憩いの場として多くの方にご利用いただきました。Elix Café では江戸川区のカフェにご協力いただき、サクサクトーーーク！では船堀に工場を構える煎餅屋さんの煎餅を配布するなど、CBI 学会年次大会の会場として長きに渡りお世話になっている船堀の魅力を同時に味わっていただく企画でもありました。

ご来場いただいた多くの参加者の皆様にとって実りの多い大会となっていれば幸いです。



大会長講演

「多面的モデリングの基礎としてのデータ統合— AI 創薬に向けて」

10月29日(火) 10:10-10:40 5F 大ホール

座長：夏目 やよい (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)

大会長 水口 賢司 (大阪大学 蛋白質研究所)



水口 賢司 先生

CBI 学会 2024 年大会二日目は、水口 賢司先生 (大阪大学 蛋白質研究所) による大会長講演が開催されました。水口先生がこれまでどのような研究に従事されてきたか、また大会テーマ「多様性を生み出すデータベースとモデリング研究」に込められた想いや現在進められている研究のご紹介など、幅広いトピックスが盛り込まれたご講演でした。

人工知能・機械学習の技術の発展がこれまでになく加速している中、「技術」が注目を集めがちである一方、その技術を目的に則した利活用へと繋げるためには「データ」が必要です。本講演では、学習用データの入手において現状どのような課題があるのか、それらに対してどのような対策を講じてきたのかについて、具体例とともに言及されました。安全性について懸念されているナノ粒子の毒性予測モデルを構築するために大量の文献から必要な情報を収集し、それを用いて構築した予測モデルの精度評価をインハウスで収集した実験データを用いて実施した例や、標的となる RNA に結合して疾患関連タンパク質の発現を制御する人工核酸のデザインにおいて重要なパラメーターである T_m (melting temperature) の予測モデルを構築するために新しい実験手法による独自のライブラリ構築を実施した例、更には薬剤に対して各代謝酵素はどのくらいの割合で寄与しているのかを予測するモデルを構築するために公共データベースから取得したデータに対してマニュアルキュレーションを実施した例をご紹介いただき、技術を創薬 AI 研究に活かすために必要なデータの確保にどのような工夫や努力がなされているか、それらの重要性を強調されました。

このように、質と量が担保されたデータを作成する苦労やそのような努力があってこそ実現した創薬研究の成果に触れ、創薬 AI 研究における学習用データの質と量の確保が如何に重要な課題かを改めて認識させられました。多くの人の尽力によって成り立つデータベースと益々勢いづく広義のモデリング技術の両輪によって、創薬 AI 研究のより一層の発展を実現していかななくてはならないというメッセージを強く感じる大会長講演となりました。

座長 / 報告：夏目 やよい (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)

プレナリー講演

「デジタル革命と創薬：進化する企業戦略」

10月29日(火) 10:40-12:00 5F 大ホール

座長：夏目 やよい (医薬基盤・健康・栄養研究所)

(1) 角田 浩行 (中外製薬株式会社)

「中外製薬の創薬プロセスにおける AI の活用と今後の展望」

(2) 井崎 武士 (NVIDIA Japan)

「NVIDIA の描くライフサイエンスの未来：産業を変革する生成 AI 技術の活用」

プレナリー講演では、トップランナーとして創薬 AI をリードする製薬企業および IT 企業での取り組みについて、「デジタル革命と創薬：進化する企業戦略」というテーマでご講演いただきました。

中外製薬株式会社の角田 浩行先生より、「中外製薬の創薬プロセスにおける AI の活用や今後の展望」についてご紹介いただきました。抗体医薬品の臨床開発分子選定に向けた最適化 AI である「MALEXA」の開発・導入といった、創薬プロセスの効率化そのものに関わる活動のほか、社内におけるデジタル人材育成のために進めているプログラムについてもご紹介いただきました。創薬 AI を単体で研究開発しているというより、社内での活動全体を俯瞰して AI をその中に浸透させていく様な包括的な DX が進められており、その成果が実際に創薬につながってきていることが伝わるご講演でした。

NVIDIA Japan の井崎 武士先生より、「NVIDIA の描くライフサイエンスの未来：産業を変革する生成 AI 技術の活用」というテーマでご講演いただきました。NVIDIA といえば、今や AI 研究において必須となっている GPU のイメージが強いのと思われますが、それ以外にも既に生み出されている基盤モデルなどを利活用するハードルを下げるプラットフォームを提供されております。また、ラボインザループ型で AI による予測、生成、ハイスループットシミュレーションと検証実験の組み合わせにより研究開発を効率化する取り組みが既に多くの企業で進められていることが紹介され、多くの期待と課題意識を感じさせるご講演でした。

両ご講演ともに、まさに企業戦略の進化を目の当たりにする様な内容でした。技術開発の重要性はいうまでもないものの、現在創薬 AI 分野で起こっている変容は更に高い階層におけるものであり、全体の俯瞰とあるべき姿の具現化が求められていると感じさせるセッションでした。

報告：夏目 やよい (医薬基盤・健康・栄養研究所)



角田 浩行先生



井崎 武士先生

招待講演

IL01 「AI が拓く健康科学の未来（1）：アカデミアの最新動向」

2024 年 10 月 29 日（火） 14:00-15:30 5F 大ホール

座長：荒木 通啓（医薬基盤・健康・栄養研究所）

- (1) 小野 玲（医薬基盤・健康・栄養研究所）
「身体活動研究の現状とデータサイエンスとの融合への期待」
- (2) 坪山 宜代（医薬基盤・健康・栄養研究所）
「データから考える災害時の健康・栄養支援と宇宙への展開」
- (3) 清水 誠（お茶の水女子大学）
「機能性食品成分と健康長寿」

本セッションでは、アカデミアにおいて健康科学分野の研究を推進している専門家をお招きし、現在どのような問題意識があるのか、どのような研究がされているのか、そして AI 技術が健康科学分野にどのように影響を与えるのかについて、3 名の先生に将来展望も含めてご講演いただきました。

小野 玲先生（医薬基盤・健康・栄養研究所）からは、「身体活動研究の現状とデータサイエンスとの融合への期待」と題して、健康づくりのための身体活動・運動ガイド 2023 の概要や近年の身体活動研究のトレンドについて、ご講演いただきました。個人の身体活動（+座位行動）の精緻な分析と健康アウトカムとの関係についての研究や、特定健診データにおける採血・生活習慣情報、医療介護レセプトデータを統合することで、身体活動以外の生活習慣や薬剤と相互作用における疾病発症についての研究をご紹介いただくとともに、身体活動研究とデータサイエンスが融合する上での課題と期待について議論しました。

坪山 宜代先生（医薬基盤・健康・栄養研究所）からは、「データから考える災害時の健康・栄養支援と宇宙への展開」と題して、災害時における健康・栄養支援の現状から課題、対応策について、これまでの震災時における活動事例、研究を中心にご講演いただきました。被災地における健康・栄養支援のための情報収集や最適化に向けた取り組みについて、データサイエンスへの期待や提案をいただきました。また、災害時と環境が類似した宇宙環境への展開として、「日本災害食」と「宇宙日本食」の共通点、災害時等の特殊環境の食・栄養に関するエビデンスやノウハウの宇宙環境における食環境整備への展開をご紹介いただきました。

清水 誠先生（お茶の水女子大学）からは、「機能性食品成分と健康長寿」と題して、食事や運動などの生活習慣に起因する生活習慣病について、エネルギー代謝や身体機能の改善を目指す取り組みの一環として、機能性食品成分に着目した研究についてご講演いただきました。大豆たんぱく質の一つであるβ-コングリシニンの抗肥満効果と FGF21 の関与、多価不飽和脂肪酸γリノレン酸の腸内細菌代謝産物と脂質代謝を制御する核内脂肪酸受容体 PPAR δ の活性化、に関する研究についてご紹介いただきました。

報告：荒木 通啓（医薬基盤・健康・栄養研究所）



小野 玲先生



坪山 宜代先生



清水 誠先生

招待講演

IL02 「AI が拓く健康科学の未来（2）：企業の最新動向」

2024 年 10 月 30 日（水） 10:00-11:30 5F 大ホール

座長：坪山（笠岡） 宜代（医薬基盤・健康・栄養研究所）

(1) 栢木 宏之（丸善製薬株式会社）

「3-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)propionic acid (HMPA) を産生する腸内細菌と宿主の相互作用に関する研究」

(2) 中野 礼彪（雪印メグミルク株式会社）

「乳製品の摂取量と骨関連指標との関係性」

(3) 宮崎 匡史（花王株式会社）

「ビッグデータ解析による内臓脂肪の医学的意義の解明」

(4) 井田 正幸（サントリーウエルネス株式会社）

「サントリーウエルネスにおける個別化栄養研究の取り組み」

CBI 学会 2024 年大会 3 日目の午前は、「AI が拓く健康科学の未来（2）：企業の最新動向」というテーマの招待講演を開催致しました。分子生物学的アプローチによる機能性成分の研究や、疫学的アプローチによる健康維持に重要な因子の探索など、エビデンスに立脚した商品・サービス開発が進められていることを多様なトピックスを通して窺い知ることができました。

栢木 宏之先生（丸善製薬株式会社）より、「3-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)propionic acid (HMPA) を産生する腸内細菌と宿主の相互作用に関する研究」というタイトルでご講演いただきました。様々なポリフェノールが腸内細菌に代謝されると共通して HMPA が産生されることから、ポリフェノールの機能性の一部は HMPA の機能性によるものではないかという独自性の高い研究を進められていることをご紹介いただきました。

中野 礼彪先生（雪印メグミルク株式会社）より、「乳製品の摂取量と骨関連指標との関係性」というタイトルでご講演いただきました。疫学研究を通して、特に閉経後女性において乳製品摂取量と骨関連指標の間に関連があることを示し、健康寿命延伸の観点で乳製品摂取が有望である可能性をご紹介いただきました。



栢木 宏之先生



中野 礼彪先生



宮崎 匡史先生



井田 正幸先生

宮崎 匡史先生（花王株式会社）より、「ビッグデータ解析による内臓脂肪の医学的意義の解明」というタイトルでご講演いただきました。内臓脂肪がメタボリックシンドロームやロコモティブシンドローム（ロコモ）に対してどの様に影響するかを疫学的アプローチにより分析した結果、内臓脂肪とロコモの間に因果関係があることが示唆されたことをご紹介します。

井田 正幸先生（サントリーウエルネス株式会社）より、「サントリーウエルネスにおける個別化栄養研究の取り組み」というタイトルでご講演いただきました。人によって食後に血糖値が上がりやすい食べ物が異なっており、その傾向は生活習慣などのデータにより予測可能であること、それを踏まえて日本人の食後血糖予測アルゴリズム開発を進めていることをご紹介します。

正常と異常の比較、といったアプローチを取ることが難しい健康科学の研究では、生活習慣や腸内細菌といったデータの網羅的・統合的解析に対する潜在的なニーズ・期待は一層高まっていくのではないかと考えさせられるセッションとなりました。

報告：夏目 やよい（医薬基盤・健康・栄養研究所）



記念講演 <若手奨励賞受賞講演> 10月28日(月) 17:30-19:00 5F 大ホール

2024 年度 CBI 学会若手奨励賞

受賞 水野 忠快 先生 (東京大学大学院薬学系研究科)

受賞講演

「化合物作用の理解に向けた恣意性のない数値化とパターン認識」

CBI 学会会長

相良 武 (大鵬薬品工業株式会社)

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、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若手の研究者に対して、CBI 学会若手奨励賞を授与しています。

2024 年度の CBI 学会若手奨励賞は、学術性、成長性、波及性、そして CBI 学会への貢献度を基に厳正に選考された結果、水野 忠快先生 (東京大学大学院薬学系研究科分子薬物動態学教室 助教) に授与されることとなりました。

水野 忠快先生は、まだ認識されていない医薬品の作用を明らかにすることで、医薬品の真の作用を理解しようとする研究に取り組まれています。具体的には、医薬品に関するさまざまなデータを恣意性なく数値化し、その後、パターン認識を試みるアプローチで解析を進めています。この研究が進展することで得られる情報は、創薬のあらゆる段階において活用されることが期待されています。

これらの功績を称え、2024 年の CBI 学会大会において CBI 学会若手奨励賞の表彰式が執り行われ、受賞記念講演が開催されました。



CBI 学会 若手奨励賞を受賞して



水野 忠快

東京大学大学院薬学系研究科

2024年度CBI学会若手奨励賞を受賞し、心より光栄に存じます。CBI学会の関係者の皆様、共同研究者の皆様、そしてチームのメンバーに深く感謝申し上げます。

我々は、生命科学データにおけるパターン認識の探求を中心に研究を進めています。

潜在変数の概念は、1904年に心理学者 Charles Spearman（順位相関係数で知られる Spearman 博士）によって初めて提唱されました。観測不可能な「知能」を、観測可能な知能テストの結果から推定する試みとして発展し、その後、因子分析として多くの分野で応用されています。医薬品の作用に関するデータ解析を行う中でこの概念に触れた際、視界が開けたような感覚を覚えました。ドラッグリポジショニングや予期せぬ有害事象に関連する医薬品の未知の側面もまた、観測不可能な潜在変数とみなすことができます。同様に、分子生物学におけるパスウェイもその一例と言えるでしょう。このように私たちの日常の営みや科学の中には、観測できないながらも扱われている多くの概念があります。データ駆動型に潜在変数を抽出することの意義の一つは、それらの概念を可視化し、符号化することです。データから潜在変数やパターンを抽出し、可視化することで議論の土台を提供することができます。これにより、既存知見との照合を経て、既知と未知を整理し、符号化可能な形へと進めることができます。すなわち、パターン認識を通じて Unknown unknowns を減らし、Known knowns、および Known unknowns を増やすことが可能となるのです。

生命科学は実験の蓄積と科学技術の進展により、新たなフェーズを迎えています。多様な生命科学データをどのように扱うことでどのようなパターンが見出せるか——この問いに対する探求を、今後も続けていきたいと考えています。

記念講演 <特別講演>

10月28日(月) 17:30-19:00 5F 大ホール

特別講演

「バイオインフォマティクスが拓く医療と創薬」

座長：夏目 やよい（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）

山西 芳裕（日本バイオインフォマティクス学会 (JSBi) 会長 / 名古屋大学大学院情報学研究科）



山西 芳裕先生

日本バイオインフォマティクス学会 (JSBi: Japanese Society for Bioinformatics) は、本邦におけるバイオインフォマティクスの発展と振興、教育基盤確立を目的として 1999 年に設立されて以降、当該分野最大の国際学会である ISCB (International Society for Computational Biology) の地域グループとしての活動をはじめとして日本のプレゼンスを高めてきました。近年、次世代シーケンサーなどの技術の普及や様々なデータベースの整備などの恩恵を受けて、生命科学ビッグデータを如何に利活用するかといった観点から、バイオインフォマティクスへの期待は急速に高まっています。化学、生物学などの学問分野を横断した総合力が問われる創薬において、バイオインフォマティクスの最新動向はより一層存在感を増していると言っても過言ではないでしょう。

CBI 学会 2024 年大会では、CBI と JSBi の相互交流の一環として、日本バイオインフォマティクス学会会長の山西 芳裕先生（名古屋大学大学院情報学研究科）に「バイオインフォマティクスが拓く医療と創薬」というテーマでご講演いただきました。

山西先生が推進しておられる多岐に渡る研究成果についてご紹介いただきましたが、共通して認められるのは「どの様なデータを、どのように用いるのか。医療や創薬におけるどの様な問題点に対して、どの様なアプローチを取るのか」といった、まさに本学会テーマの「データベース」と「(機械学習を含む) モデリング」の組み合わせの妙でした。使えるリソースで何ができるのか、ではなく、医療や創薬における課題に対して何が必要なのか、という方向性で上記組み合わせが適切にデザインされていることが、その研究成果の社会的意義に繋がっていることが伝わってくるご講演でした。

報告：夏目 やよい（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）

公開シンポジウム

分子ロボット倫理シンポジウム

「分子ロボット創薬への期待と現実とのギャップの解消に向けて」

10月28日(月) 13:00-17:00 5F 小ホール

モデレーター：小長谷 明彦（東京工業大学名誉教授 / 恵泉女学園大学客員教授 /

CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所 / 株式会社分子ロボット総合研究所）

- (1) 小長谷 明彦（CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所）
基調講演「分子ロボットの医薬品応用への期待と現実」
- (2) 河原 直人（九州大学病院 ARO 次世代医療センター）
「分子ロボット倫理の取組みと社会共創に係る展望」
- (3) 豊田 太郎（東京大学大学院総合文化研究科）
「ジャイアントベシクルを用いた医療支援ツールの開発」
- (4) 池田 将（岐阜大学工学部化学・生命工学科）
「グルコサミン誘導体型分子からなるインジェクタブルゲルの開発」
- (5) 浜田 省吾（東京科学大学情報理工学院）
「スライム型分子ロボットとその医療応用への展望」
- (6) 松下 琢（崇城大学生物生命学部）
「正常細胞とがん細胞の細胞膜の性質を自身で見分ける新規脂質ナノ粒子制がん剤」
- (7) 神谷 厚輝（群馬大学大学院理工学府分子科学部門）
「分子集積による外部刺激に応答する生体分子ロボットの構築」
- (8) 山西 陽子（九州大学大学院工学研究院機械工学部門）
「細胞内サイバネティック・アバターの遠隔制御によって見守られる社会の実現」
- (9) 五十子 敬子（尚美学園大学名誉教授）
「医薬品・医療機器製品化への法と倫理」

DNA やタンパク質などの生体分子を組み合わせて、感覚と知能と運動機能を持つ人工物を創生する研究は「分子ロボット」と呼ばれており、日本を中心に新たな研究領域として注目を集めている。分子ロボットはその出自から生体との相性がよく、医薬品分野への応用が期待されている。しかしながら、現状では分子ロボットの医薬品応用研究は十分進んでいるとは言い難い。このような問題意識から開催された本シンポジウムには約 50 名の聴衆が参加し、分子ロボットの医療応用に向けて分子ロボット研究者と医療系倫理・医事法研究者の間で活発な議論が展開された。

はじめに、本シンポジウムのオーガナイザーである小長谷 明彦が、分子ロボット研究のこれまでの経緯と共に、分子ロボット創薬を実現するためには基礎研究成果をそのまま応用展開（プロダクトアウト）するのではなく、実ニーズと整合する研究目標に向けた革新的技術を開発（マーケットイン）することの重要性を指摘した。次に、河原 直人先生（九州大学病院）は、分子ロボット倫理のこれまでの経緯と共に、先端科学技術と倫理との伴走の重要性および分子ロボット創薬に向けて「社会共創」や「PPI=Patient and Public Involvement（研究への患者・市民参画）」の概念が重要であることを強調した。



引き続き、医薬品応用向け先端分子ロボット研究に関しては、豊田 太郎先生（東京大学）が細胞サイズの人工小胞体であるジャイアントベクシルを用いた医療支援のケーススタディについて、池田 将先生（岐阜大学）は保水力があり軟骨成分の原料として知られているグルコサミンの誘導体型分子からなるインジェクタブルゲルについて、浜田 省吾先生（東京科学大学）は酵素反応を利用して「成長する」DNA ハイドロゲルを用いたスライム型ロボットとその DNA 検出応用について講演した。

さらに、松下 琢先生（崇城大学）は脂質分子とミセル分子を混ぜ合わせた「ハイブリッドリポソーム」による自律的な正常細胞とがん細胞の認識とがん細胞のアポトーシス誘導について、神谷 厚輝先生（群馬大学）は外膜をリン脂質、内膜を両親媒性タンパク質とした人工非対称膜小胞を用いて、外部刺激により小胞分裂や膜張力変化をする生体分子ロボットの構築について、山西 陽子先生（九州大学）はムーンショットプロジェクトで行われている細胞内サイバネティック・アバターの遠隔制御によって見守られる社会のコンセプトと関連技術について講演した。

最後に、五十子 敬子先生（尚美学園大学名誉教授）より分子ロボットの医療応用に関して、分子ロボットの治験への道筋について医事法と生命倫理の視点からの留意点に関する講演がなされた。分子ロボットは「知能」を持つということの特徴としているが、本シンポジウムでの議論により、ヘルシンキ宣言との整合性が分子ロボット医療応用ガイドラインの論点の一つとなることが確認された。

報告：小長谷 明彦（東京工業大学名誉教授 / 恵泉女学園大学客員教授 /
CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所 / 株式会社分子ロボット総合研究所）



スポンサードシンポジウム

SP01 学術変革領域研究 (A)

「天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く生物活性分子デザイン」

10月29日(火) 14:00-15:30 2F 平安

モデレーター：大上 雅史 (東京科学大学)、鎌田 真由美 (北里大学)

- (1) 大上 雅史 (東京科学大学)
「潜在空間分子設計の挑戦」
- (2) 齋藤 裕 (北里大学 / 産業技術総合研究所)
「天然物と微生物の関係性から化合物潜在空間を描く」
- (3) 牧垣 秀一郎 (北里大学 未来工学部)
「マルチモーダルな生物活性情報の統合と活用に向けた情報基盤設計」
- (4) 小島 諒介 (京都大学)
「有機合成のデジタル化に向けたデータ駆動反応予測 AI 基盤の開発」

本セッションでは、令和5年4月より開始した科学研究費助成事業 学術変革領域研究 (A)「天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く生物活性分子デザイン」において情報科学を担う計画研究の展開についてご紹介するとともに、令和3年より先導して開始されている学術変革領域研究 (A)「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」における AI 開発について情報共有をいただきました。

セッション冒頭では、大上 雅史先生 (東京科学大学) より、潜在空間分子設計の概要と計画研究として進められている研究進捗をご紹介いただきました。領域の目的である実験との融合による設計の推進において、AI による高精度な推定だけでなく説明可能性が重要であるとし、天然物らしさを表現するための化学言語モデルを活用した AI や、反応条件を考慮した潜在空間の拡充など、幅広い研究成果について共有いただきました。

齋藤 裕先生 (北里大学 / 産業技術総合研究所) からは、計画班 (榊原班) の分担研究として実施されている、微生物ネットワークを活用したご研究について紹介いただきました。既存薬の多くが微生物の二次代謝産物をリソースとしていることに基づき、自然界における微生物と化合物の関係を表すネットワークを活用した新たな特徴量抽出と、それをを用いることで化合物 - タンパク質相互作用予測の精度向上ができたことをご報告いただきました。潜在空間の拡充と新たなリソースへの展開が見込めるご発表に対し、会場からは感染症にスクリーニングソースの枯渇に関するコメントがあり、当領域で進めている潜在空間の構築と拡充には大いに意義があることを改めて確認することができました。



牧垣 秀一郎（北里大学）先生からは、領域で生成される大規模かつ多様なマルチモーダルデータを統合し、活用するための情報基盤構築について紹介いただきました。講演では、天然物をはじめとした独自ライブラリと既存データベースの化合物の統合について、構造類似性に基づくアプローチをお示しいただき、空間拡張に向けた課題についても共有いただきました。

小島 諒介先生（京都大学）には、「デジタル有機合成」領域から、これまでの領域でのコラボレーションや AI 開発の状況について情報共有をしていただきました。ご講演では、有機化学における AI 技術の実用化を進めるにあたり、実際のデータ整備や基盤技術での課題についてもお紹介いただき、領域を超えて課題を共有することができました。

当日は多くの方に参加いただき、領域を超えた情報共有ができたとともに貴重なご意見をいただくことができました。演者の先生、ご参加いただいた皆様、会場運営に携わってくださった皆様に感謝申し上げます。

報告：鎌田 真由美（北里大学）、大上 雅史（東京科学大学）



スポンサードシンポジウム

SP02 「革新的創薬支援ツールとしての

New Approach Methodologies (NAMs) 最前線」

10月30日(水) 10:00-11:30 2F 平安

モデレーター：山崎 大樹（国立医薬品食品衛生研究所）、石田 誠一（国立医薬品食品衛生研究所 / 崇城大学）

- (1) 石田 誠一（国立医薬品食品衛生研究所 / 崇城大学）
「細胞を用いた新規アッセイ法への最近の取り組み状況」
- (2) 荒川 大（金沢大学）
「薬物誘発性腎障害の *in vitro* 評価における画像診断の有用性」
- (3) 安部 賀央里（名古屋市立大学）
「皮膚感作性評価における機械学習モデルの活用」
- (4) 山崎 大樹（国立医薬品食品衛生研究所）
「心臓収縮機能に特化した *in vitro* to *in vivo* extrapolation (IVIVE)」

近年、革新的創薬支援ツールとして動物に依存しないアッセイ系、いわゆる New Approach Methodologies (NAMs) の開発が盛んに行われている。2022 年米国で成立した FDA 近代化法 2.0 においても、動物実験を必ずしも必要としないことを前提に、Cell-based assay、臓器チップや生体模倣システム（microphysiological systems: MPS）、コンピュータモデリング等の具体的なアッセイ系が非臨床試験の例として記載されている。マイクロ RNA、メタボロミクスなど様々な革新的技術が創薬に応用され、ゲームチェンジャーとして有力視されてきたが、時間の経過とともにその期待度は変化している。今、期待度の大きいアッセイ系として画像診断、モデリング&シミュレーション、臓器チップ等が挙げられる。また、いずれのアッセイ系においても *in vitro* / *in silico* の結果を *in vivo* にどのように橋渡しするか、という点は常に課題となっている。

本シンポジウムでは上に記した NAMs のうち、崇城大学 石田 誠一教授から MPS について、金沢大学 荒川 大准教授から画像診断について、名古屋市立大学 安部 賀央里先生からモデリング&シミュレーションに関する研究成果を報告していただいた。また、山崎からは *in vitro* から *in vivo* への外挿性向上という観点からの研究について報告し、革新的創薬支援ツールとしての NAMs について議論を深めた。

石田先生は、MPS を中心に細胞アッセイ技術に関する近年の開発状況を概観し、ついで MPS データの行政利用に向けた我々の取り組みについて紹介していただいた。荒川先生は、DIKI の主要ターゲットとなる近位尿管上皮細胞の三次元培養系に着目し、種々の腎障害誘発性薬物を曝露した後、各種オルガネラ機能マーカーを用いた画像診断を行なった解析事例を紹介していただき、その有用性や課題について議論した。安部先生は、計算毒性学に基づいて、*in vitro* や *in silico* の NAMs を組み合わせた機械学習による安全性予測に取り組みされており、その中から化粧品等の皮膚感作性評価支援ツールとして開発した感作性強度予測モデルを紹介していただいた。最後に山崎から、ヒト iPS 心筋細胞から作製した三次元心筋組織による収縮データをいかにモルモット心エコーデータへ橋渡しをするか、さらにはヒト心エコーデータへ橋渡しをしていくかについて紹介した。



CBI 学会とは一部かけ離れたテーマもあったが、40-50 名程度の聴衆にご参加いただき、活発な討論がなされた。演者の先生方ならびに議論に加わっていただいた参加者の皆様に感謝致します。

報告：山崎 大樹（国立医薬品食品衛生研究所）

フォーカストセッション

FS01 「化学構造情報を用いた計算 ADMET 研究の新展開」

10月29日(火) 14:00-15:30 4F 研修室

モデレーター：植沢 芳広 (明治薬科大学)、長谷川 清 (テクノプロ R & D)

(1) 植沢 芳広 (明治薬科大学)

「Ames/QSAR 国際チャレンジおよび Tox24 チャレンジからみた QSAR 予測の到達点」

(2) 清水 忠 (兵庫医科大学薬学部)

「化学構造」×「臨床研究データ」を起点とした基礎研究の着想」

(3) 長谷川 清 (テクノプロ R & D)

「製薬会社での ADMET 予測および臨床での応用」

化学構造には医薬品開発において重要な情報が多く含まれており、その分析を通じて ADMET に関わる生理活性の予測や臨床的イベントの発生メカニズムの解明に繋がることが期待されています。本セッションでは、化学構造情報と計算技術を駆使した ADMET 研究に関する最先端の知見を、企業、臨床、アカデミアの視点から共有することを目的に開催されました。

第 1 席では、本稿の報告者である植沢 (明治薬科大学) から、最近実施された QSAR 予測に関する国際的なコンペティションにおける成果を紹介いたしました。Ames/QSAR 国際チャレンジでは提出された総計 109 種類の予測結果を集計して化合物のカバー率が 100% であった場合の予測性能を推定した結果、我々のモデルは種々の評価指標において最高精度を示しました。一方、トランスサイレチン関連活性を予測対象とした Tox24 チャレンジでは 4 位の精度を獲得しました。本講演ではこれらの予測モデルの詳細について解説しました。

第 2 席は、清水 忠先生 (兵庫医科大学薬学部) に、化学構造と臨床研究データを起点とする基礎研究の着想についてご講演いただきました。清水先生は、副作用データベースを活用し、仮説生成型研究を展開する取り組みを紹介してくださいました。また、ドラッグリポジショニングにおける医薬品選択の効率化を目的とした機械学習モデルの導入について述べられました。ご講演では、基礎研究における新たな視点を提供し、化学構造と臨床研究の融合の可能性を示していただきました。

第 3 席の長谷川 清先生 (テクノプロ R & D) は、製薬会社での ADMET 予測と臨床での応用に関して紹介してくださいました。ローカルデータを活用した予測モデルの構築や、生成 AI との融合による新たなソリューション開発の事例に関する解説をいただくとともに、予測モデルを用いた薬物デザインの支援システムを実例として挙げられ、実際の製薬プロセスへの貢献について紹介していただきました。現状の課題と今後の可能性についても議論がなされ、企業における ADMET 研究の最前線を垣間見る内容となりました。

本セッションでは 90 名もの方々に参加していただき、活発な議論が行われました。化学構造情報と計算技術を活用した最先端の研究成果が共有され、分野を超えた視点からの意見交換が行われたことで、計算 ADMET 研究の発展に向けた重要なセッションになりました。このような盛会になりましたことをご参加いただいた方々、関係者の皆様方に深く感謝致します。



報告: 植沢 芳広 (明治薬科大学)

フォーカストセッション

FS02 「計算と実験の融合による核酸医薬開発の動向と展望」

10月29日(火) 14:00-15:30 4F 407

モデレーター：渡邊 博文（株式会社ウィズメーティス）、山岸 賢司（日本大学）、石川 岳志（鹿児島大学）

(1) 塚田 洋之（日産化学株式会社）

「分子動力学シミュレーションを活用したアンチセンス核酸設計技術の開発」

(2) 坂本 泰一（千葉工業大学先進工学部 生命科学科）

「核酸医薬の立体構造と物理化学的特性」

(3) 山岸 賢司（日本大学工学部 生命応用化学科）

「核酸分子に対する分子シミュレーション解析」

本セッションは、「計算と実験の融合による核酸医薬開発の動向と展望」と題して、核酸医薬開発における計算化学解析の現状や、今後の展望などについて、核酸研究に携わっている3名の先生方に講演をしていただきました。

日産化学の塚田 洋之先生からは、核酸医薬品について基本的な事項から研究開発上の課題について説明がありました。後半では、アンチセンス核酸 (ASO) の配列設計において、計算化学を用いた設計手法の開発に取り組まれている現状について講演されました。企業研究の観点での考察や現状の課題などをお話いただき、興味深い講演となりました。

千葉工業大学の坂本 泰一先生は、構造生物学の観点から核酸分子の立体構造や物理化学的な特徴について解説されました。特に RNA アプタマーと呼ばれる核酸分子については、基礎的なことから説明していただき、RNA アプタマーの構造の多様性や構造解析の難しさを学ぶことができました。講演の後半では、抗体に結合するアプタマーに対する最新の研究について説明があり、日本大学の山岸先生との共同研究で進めている計算化学による相互作用機序の理解と、それを利用したアプタマーの改良の試みについて報告がありました。

日本大学の山岸 賢司は、計算化学を専門とする立場から、核酸分子、特にアプタマーに対する計算化学解析の現状について講演しました。抗体に特異的に結合するアプタマーの立体構造やアプタマーと結合する分子との間に働く分子間相互作用を、量子化学計算や分子動力学計算などの分子シミュレーション手法を用いて解析している事例を紹介し、新たなアプタマーの設計に展開している取り組みについて報告をしました。

本セッションには、会場に入りきれないほどの参加者の方に聴講いただき、議論も活発に行われました。核酸医薬品は低分子医薬や抗体医薬とは異なりタンパク質の発現を遺伝子レベルで制御することから、低分子医薬品や抗体医薬では治療が難しい疾患に対して、治療の可能性をもたらす新たな創薬モダリティとして期待されています。分子シミュレーション解析をはじめとする計算化学手法は、創薬研究において実用的な研究ツールとなってきているものの、核酸に対する解析例はまだ少ないのが現状です。今回の講演を機に、核酸医薬に対する計算化学解析の有用性が認識され、より発展することを期待させられるものでした。

(聴講者 50名以上)

報告：山岸 賢司（日本大学）、渡邊 博文（株式会社ウィズメーティス）、石川 岳志（鹿児島大学）



チュートリアル

TS01 計算 ADMET 研究会 チュートリアル

ハンズオンセミナー：計算 ADMET 研究関連ソフトウェアの活用

10月28日(月) 13:00-17:00 4F 研修室

モデレーター：植沢 芳広 (明治薬科大学)、江崎 剛史 (滋賀大学)

創薬を加速して効率的に開発を進めるためには、初期段階で化合物の性質を推測し、有望な化合物を選択することが重要である。その目的で、機械学習によって構築した予測モデルを使い、化合物の特性が予測されるようになってきている。予測モデルを構築するモデリングは、AutoML システムやライブラリの開発などによって、近年特に身近なものとなってきている。しかしそれでも、プログラミングに馴染みのないウエットの研究者にとっては、モデリングは高いハードルとなっており、導入に障壁がある。

そこで本チュートリアルでは、プログラミングに馴染みのない研究者であっても、モデルによる特性予測の体験を通してモデリングを身近に感じ、研究に特性予測を組み込むための一助となることを目指し、株式会社アフィニティサイエンスと富士通株式会社の2社にソフトウェアを使ったモデリングが実施できるチュートリアルを企画いただいた。

チュートリアルの時間を前半(株式会社アフィニティサイエンス)と後半(富士通株式会社)の二部に区切り、以下のプログラムで実施した。

【プログラム】

- (1) 13:00-14:50 alvaDesc/YASARA ハンズオンセミナー (株式会社アフィニティサイエンス)
- (2) 15:10-17:00 薬物動態予測モデルの作成 (富士通株式会社)

前半を担当いただいた株式会社アフィニティサイエンスには、alvaDesc (Alvascience 社製) と YASARA (YASARA Biosciences 社製) を使ったチュートリアルを実施していただいた。alvaDesc は分子の構造を定量化するための特徴量変換ツールであり、SMILES などの構造情報を入力することで、5000 を超える多様な分子記述子と、3種類のフィンガープリントを計算することができる。事前に準備したデータセットを配布いただき、alvaDesc で特徴量を算出し、変数の削減や相関分析、主成分分析を行うことで、特性予測に重要な解析の基礎について講習いただいた。次に使用した YASARA は、生体高分子の可視化やモデリング・シミュレーションが可能なソフトウェアである。このソフトウェアを使用し、PDB ファイルを取り込み、分子動力学計算を行った。講習者向けに各種設定を施したマクロを用意していただいております、短い時間の中で効率的にシミュレーションを体験できる機会となった。



後半を担当いただいた富士通株式会社からは、ケモインフォマティクスに関心がある研究者が、自分でモデリングを行うことを目指し、Jupyter 上で Python と OSS ライブラリを使用したチュートリアルを実施いただいた。富士通株式会社の製品である ADME 予測システム、SCIQUICK に搭載されているデータセットを配布し、低分子化合物の薬物動態パラメータの予測モデルを作成する手順を講習いただいた。

チュートリアルの時間を二部に分けて実施したため、時間の関係で実施できる項目は多くはなかったが、いずれも 30 名を超える参加者があった。また、チュートリアル後には参加者が講演者に質問に行き、議論を行う様子を伺うことができたことから、満足度の高いチュートリアルを開催できたと考えている。

報告：江崎 剛史（滋賀大学）



チュートリアル

TS02 第 35 回 FMO 研究会

FMO データベース実践チュートリアルプログラム

- 生体高分子の量子化学的分子間相互作用データの活用 -

10月28日(月) 13:00-17:00 4F 401

モデレーター：渡邊 千鶴 (国立研究開発法人理化学研究所)、加藤 幸一郎 (九州大学)、宮川 柊兵 (大阪大学)

フラグメント分子軌道 (FMO) 計算結果を収載した FMO データベース (FMO DB; <https://drugdesign.riken.jp/FMO DB/>) は、2019 年 2 月の一般公開以来データ数を増やし、富岳等のスパコンを活用し 2024 年 7 月 29 日時点で 37,426 個の FMO 計算データ (ユニークな PDB ID: 7,782) を公開している。最近では、FMO データを活用した情報生命科学アプローチとして相互作用エネルギーの特徴量抽出や AI 予測等の取り組みも始まっている。本セッションでは、まず FMO 計算を始めようと考えているユーザー向けに FMO DB の概要を紹介し、実際に登録されているデータを用いて、創薬研究に用いるための解析方法や最新の研究事例を紹介した。

【プログラム】

- 13:00-13:05 はじめに 宮川 柊兵 (大阪大学)
- 13:05-14:35 FMO データベースの紹介とデータ活用方法 渡邊 千鶴 (理化学研究所)
- 14:35-14:55 休憩
- 14:55-16:25 FMO DB データ対象とした相互作用クラスタリング解析 御幡 瑠璃 (大阪大学)
- 16:25-16:35 まとめ 加藤 幸一郎 (九州大学)
- 16:35-17:00 個別相談等

チュートリアルでは、まず渡邊 千鶴講師 (理化学研究所) のセッションにおいて FMO DB を利用しようと考えている初心者に向けた FMO DB の Web インターフェイスの基本機能と最近実装された詳細検索機能、BioStation Viwer と FMO DB の連携、IFIE ダイアグラムの機能について実際に FMO DB や BioStation Viewer の操作を交えて紹介された。また、FMO DB データの活用に向けた、ターゲットタンパク質の構造情報や、モデリング手法などの各種条件設定によるデータ検索方法も FMO DB を用いて紹介された。

次のセッションでは、FMO DB の活用事例として、御幡 瑠璃講師 (大阪大学) により、FMO DB に公開されているエストロゲン受容体 (ER) β 複合体の計算結果を例に、BioStation Viewer を使用した相互作用解析を行った。加えて複数の複合体構造に対して、VISCANA (Visualized Cluster Analysis of Protein-Ligand-Interaction) 機能を用いた解析の実施と、解析結果の解釈についての複数のリガンドと ER β 間のフラグメント間相互作用 (IFIE) のクラスター毎の特徴についての考察が紹介された。



当日は 32 名の参加者、講師等の関係者を含めると 40 名の参加があり、チュートリアル後のアンケート結果等からおおむね好評に開催することが出来た。また、参加者から FMO DB への開発を希望する機能や、今後のチュートリアルの発表形式・資料等にも有益なコメントをもらうことが出来た。

報告：渡邊 千鶴 (国立研究開発法人理化学研究所)、
加藤 幸一郎 (九州大学)、
宮川 柊兵 (大阪大学)

チュートリアル

TS03 ケモインフォマティクスハンズオン
ケモインフォマティクス入門プログラム

10月28日(月) 13:00-17:00 4F 407

モデレーター： 芹沢 貴之（第一三共株式会社）、大川 和史（旭化成ファーマ株式会社）、
新井 浩一郎（旭化成ファーマ株式会社）、高橋 一敏（味の素株式会社）、
宮野 奈津美（帝人ファーマ株式会社）

ケモインフォマティクスの分野においても、バイオインフォマティクス同様に多くのオープンソースソフトウェア（OSS）が研究や実務において活用されつつある。しかし、OSS に関する体系的な情報の不足や、実務への適用における試行錯誤が必要な点から、十分に活用するためには高いスキルと工夫が求められる。昨年的好评を受けて開催された第 2 回ハンズオンチュートリアルでは、Python を用いた生成モデル、ドッキングスタディ、スコアリングといったワークフローを Flow-based Programming (FBP) で実装する実務者向けのセミナーを実施したので報告する。

本セミナーにはアカデミアおよび企業から計 31 名の研究者が参加し、OSS を用いたケモインフォマティクスワークフロー構築を学習した。参加者は事前に、Github 上に準備されたリポジトリからコードをダウンロードし、自身の PC で環境構築を行った上で参加した。以下が当日のプログラムである。

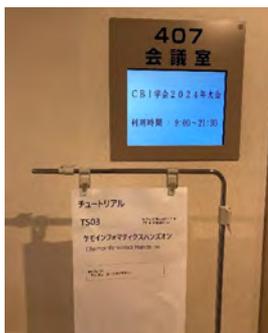
【プログラム】

1. Flow Based Programming (FBP) についての概要解説
2. 環境構築の確認
3. REINVENT4 を用いた EGFR 阻害剤構造の転移学習、転移学習後の生成モデルによる仮想化合物群の生成
4. Gypsum-DL を用いた構造ベースの仮想スクリーニング (SBVS) 前処理
5. AutoDock Vina を用いて EGFR キナーゼドメインに対する SBVS を実行、pymol による結果確認
6. maize を活用した FBP ツールによる SBVS のワークフロー化

ハンズオンは、コードを実際に動かすことで理解を深める形式で実施した。参加者の中には、Pipeline Pilot や KNIME といったワークフローソフト利用経験を有する方が 6 名ほどいたが、ワークフローツールの利用は初めての方が多く見られた。また、REINVENT3 や REINVENT4 の利用経験者は 2 名のみであったことから、多くの参加者にとって生成モデルや FBP ワークフローの実装は新しい挑戦となった。しかし、多くの参加者が本プログラム全体を通して得た技術やツールの応用可能性を実感し、実務に活用するための具体的なイメージを持ちやすくなったことで、非常に有意義な学習機会となったと考えられる。

環境構築が昨年と同じくうまくいかないケースがみられた。今後の課題として引き続き検討していきたい。

報告： 芹沢 貴之（第一三共株式会社）、大川 和史（旭化成ファーマ株式会社）、
新井 浩一郎（旭化成ファーマ株式会社）、高橋 一敏（味の素株式会社）、
宮野 奈津美（帝人ファーマ株式会社）



口頭発表

001 創薬応用 -1-

10月29日(火) 14:00-15:30 4F 401

座長：遠藤 智史（岐阜大学）、熊澤 啓子（帝人ファーマ株式会社）

本セッションは「創薬応用」をキーワードに、RNA ターゲットの低分子ヒット取得アプローチ、環状ペプチドデザインプラットフォーム、DNA-encoded library (DEL) のスクリーニングデータ解析、遺伝子発現プロファイルを考慮した化合物構造生成、多目的最適化を志向した化合物構造生成、天然物の活性予測マルチタスク学習に関する研究成果が6名の発表者から報告された。

Veritas In Silico の森下 えら氏は、独自に開発した RNA 二次構造予測 / 構造解析ソフトウェアで低分子創薬に適したターゲットを選定し、qFRET スクリーニング、BLI、NMR、ITC によるヒット低分子特定後、フラグメント分子軌道法 (FMO) 法の IFIE と ITC の間に高い相関を確認し、有望な化合物の予測に適用した一連の流れを紹介した。

中外製薬の松尾 篤氏は、環状ペプチド創薬において、タンパク-タンパク間相互作用の pdb 解析による最適な部分構造デザイン、ペプチドのアシル化加水分解機構を利用した側鎖改変技術、カスタマイズした fingerprint での配列クラスタリング等の具体的事例や構築した統合データ解析環境について紹介した。

名古屋大学の鈴木 駿也氏は、真陽性 / 偽陽性ヒットを区別する機械学習アプローチを紹介した。公開 DEL スクリーニングデータから、タンパク質固定化マトリクス / 標的タンパク質との相互作用に重要な部分構造を抽出し、真陽性ヒットを特定した。

九州工業大学の松清 優樹氏は、遺伝子発現データを活用した革新的なリード最適化手法を紹介した。この手法を用いて、抗がん剤の標的であるグルタミナーゼ 1 (GLS1) の阻害剤がデザインされ、実験でも有望な阻害活性が確認された。

東京科学大学の鈴木 敬将氏は、新しいディープラーニングベースの多目的 de novo 分子生成モデルを紹介した。本手法では、エントロピーに基づく多目的バイズ最適化フレームワークを活用し、非結合設定で分子の最適化が実現された。このアプローチにより複雑な計算コストの低減が可能になることが示された。

大阪大学の Donny Ramadhan 氏は、天然物の活性予測において、天然物特有の構造多様性とデータの不足を補うためのマルチタスク学習モデルの適用を報告した。本研究では、ChEMBL データベースから得たプロテインキナーゼに対する活性データを使用し、特徴量ベースマルチタスク学習およびインスタンスベースマルチタスク学習 (IBMTL) が検証され、特に、進化的関連性指標を IBMTL に組み込んだ結果、シングルタスク学習モデルを上回る活性予測精度を示すことが示された。

本セッションでは、様々モダリティに対する多様な計算アプローチの紹介があり、発表者と多数の参加者で活発かつ貴重な意見交換がなされた。ご参加頂いた皆様に厚く御礼申し上げます。



報告：遠藤 智史（岐阜大学）、
熊澤 啓子（帝人ファーマ株式会社）

口頭発表

002 データサイエンス -1-

10月30日(水) 10:00-11:30 4F 研修室

座長：大上 雅史（東京科学大学）

本セッションは、「データサイエンス」カテゴリの口頭発表セッションとして、機械学習の応用・ケモインフォマティクスに関連する6件の口頭発表が行われました。

O2-1 東京工科大学 杉山 友康氏

生成モデルと分類モデルを組み合わせ、免疫組織化学画像中の腫瘍内毛細血管を形状に基づいて識別・分類する画像認識モデルの研究でした。

O2-2 東京工業大学 屋代 凜太郎氏

大規模言語モデル(LLM)に追加の学習を行うことで、既存の手法よりも高精度に論文のテキストから薬剤標的間相互作用を抽出する手法の研究でした。

O2-3 神戸大学 中田 柊也氏

複数の chemical language model を統合することで、既存の手法より性質の良い化合物バーチャルライブラリを作成する研究でした。

O2-4 SyntheticGestalt 株式会社 神谷 幸太郎氏

3次元構造のデータベースを高速に検索するための Simplicial Complex 構造を用いた特徴化に関する理論的な研究でした。

O2-5 東京大学 根本 駿平氏

複数の chemical language model を簡単に訓練・比較できる python ライブラリ、clmpy の開発とそれを用いたモデル間の比較研究でした。

O2-6 北海道大学 Sidorov Pavel 氏

フラグメントベースの記述子を用いた創薬・材料科学における物性予測手法と、予測に寄与する部分構造を可視化する手法の研究でした。

全体を通して60名以上の方にご参加いただき、各発表に対しては活発な質疑が行われました。これらの発表は、データベース検索、大規模データの活用、大規模言語モデル、化学言語モデルといった分野の内容であり、また理論的な研究、新規モデルの開発、実際の適用事例と様々な視点からの研究報告があったなど、本大会のテーマである「多様性を生み出すデータベースとモデリング研究」をよく表しているセッションでした。講演者、参加者および大会事務局をはじめ、ご支援いただいた各位に深くお礼申し上げます。



報告：安尾 信明（東京科学大学）

口頭発表

003 創薬応用 -2-

10月30日(水) 10:00-11:30 4F 401

座長：木下 誉富（大阪公立大学）、池上 貴史（株式会社モルシス）

本セッションは、「創薬応用」カテゴリーの口頭発表として開催されました。6名の発表者から、データベース構築、自動化、ゲノム解析、機械学習、大規模言語モデルなどの様々なアプローチによる、低分子、ペプチド、抗体などの広範なモダリティ研究の成果が報告されました。

大阪大学の NATSRITA PIYATIDA 氏は、フラビウイルスのデータベースを構築し、配列ベースの機械学習アプローチを用いることで、CDR-H3 とエピトープ配列のデータセットを作成し、その中和抗体と特徴を見出しました。本発表は口頭発表賞を受賞しました。

アステラス製薬株式会社の森 健一氏は、創薬 DX 化として生成 AI や GPU、スーパーコンピューター、ワークフロー等を活用し、同社における低分子モダリティ研究の取り組みと事例について報告しました。

株式会社 Elix の Jimenez Barrero David 氏は、ChEMBL からキュレーションされた分子を用いて、事前に学習された大規模言語モデルにより、複数の物性や分子構造を満足する分子を自動生成する手法を報告しました。

大阪大学の野島 陽水氏は、家族性大腸腺腫症由来オルガノイドにおいてシングルセル RNA シーケンシングを実施し、公開データを使用して機械学習モデルを構築し、MEK 阻害剤に耐性のある薬剤耐性持続性細胞を特定し、新しい候補薬と効果について報告しました。

京都大学の津村 颯人氏は、先行研究で報告されている、遺伝子発現プロファイルと疾患間の類似性スコアが新しい標的と疾患の予測に有益であることを参照し、ニューラルネットワークのアプローチにより、その課題であった予測精度を大幅に向上できた事例を報告しました。

名古屋大学の山畑 伊織氏は、CXCR4 に対して強い相互作用を持つ細胞透過性ペプチドの配列を、ドッキングシミュレーション、分子動力学計算、さらにディープラーニングを用いて予測する方法を報告しました。

本セッションは、多くの方に聴講頂き、企業とアカデミックの発表者と、参加者として貴重な意見交換が行われました。参加頂いた皆様に厚く御礼申し上げます。

報告：木下 誉富（大阪公立大学）、池上 貴史（株式会社モルシス）



口頭発表

004 分子ロボティクス -1-

10月30日(水) 10:00-11:30 4F 407

座長：小宮 健（海洋研究開発機構）、川又 生吹（京都大学）、多田隈 尚史（上海科技大学）

CBI 学会 2024 年大会 3 日目の口頭発表セッション 004 では、分子ロボティクスに関する 6 件の発表が行われた。

はじめに東北大学の稲葉 剛さんより "Biomimetic Multicellular Lipid-Based Membranes for Stimulus-Responsive Drug Delivery" についてご講演いただいた。ドラッグデリバリーにおける薬剤放出の制御を指向する細胞を模倣した脂質コンパートメントに関するご研究で、塩濃度等の環境刺激に対する応答性能を検証した結果などが報告された。

次に京都大学の GONG YIMING さんから "Physical Reservoir Computing Device Using Active Matter Composed of a Swarm of Biomolecular Motors" についてご発表いただいた。DNA をコンジュゲートした微小管の swarming を用いて、リザーバー・コンピューティングをコンピューター内ではなく実空間に実装する Physical Reservoir Computing のご研究で、温度や DNA 配列といった入力に対してパターン分類を行う実験の結果や、シミュレーションによる検証について報告された。

続いて東京大学の廣井 聡一郎さんより "GAN-Based Multi-Axis Resolution-Enhanced 3D Visualization of Giant Vesicles" のご講演をいただいた。ジャイアントベシクル (GV) の顕微鏡像を VR によって高精細に可視化のご研究で、データセットの構築や生成モデルの改良に関する最近の進捗が報告された。

その後に東京大学の小淵 晴仁さんより "Investigation on heterogeneous pairs of cell-sized liposomes formed in a microfluidic device" のご講演をいただいた。ケミカル AI の実現を指向する分子サイバネティクスにおいては、異なる機能を持つ細胞サイズのリポソームを特定の順に並べて信号伝達を行う技術が不可欠である。マイクロ流体デバイスを用いてリポソームのペアを選択的に配置する実験や、膜間で DNA 鎖置換反応を行った実験の結果が報告された。

次に京都大学の川又 生吹さんから "Integrated web user interface for DNA nanotechnology including coarse-grained molecular dynamics simulation" についてご発表いただいた。DNA ナノテクノロジー分野の代表的な技術である DNA オリガミでは、DNA の塩基配列を設計して様々な形態や機構の部品となるナノ構造を作成する。設計や検証を行う様々なソフトウェアおよびファイルフォーマットが開発されてきたが、フォーマット間の変換や分子シミュレーション用の GUI が未整備であるという課題に対して、web インターフェースなどを開発する研究について報告された。

最後に関西大学の近藤 洋隆さんより "Development of a Supervised Deep Learning Method for DNA Sequence Estimation from DNA Images" のご講演をいただいた。近年、深層学習を用いて AFM 画像のノイズを低減し、解像度を向上させることで配列情報を読み取る研究が行われており、修飾塩基を用いた教師あり機械学習による結果が報告された。

当日は約 30 名の参加があり、いずれも興味深い内容の研究発表に対し活発な質疑も行われて、当該分野の進展が加速している状況が伺える有意義なセッションとなった。ご講演いただいた発表者および参加者の皆様に心より感謝申し上げます。

報告：小宮 健（海洋研究開発機構）



口頭発表

O05 量子構造生命科学 / ADME・毒性 / バイオインフォマティクス

10月30日(水) 10:00-11:30 4F 406

座長：高橋 一敏（味の素株式会社）、瀧本 征佑（日本たばこ産業株式会社）、永家 聖（東北大学）

CBI 学会 2024 年大会 3 日目の口頭発表セッション O05 では、量子構造生命科学に関する演題が 1 件、ADME・毒性に関する演題が 1 件、バイオインフォマティクスに関する演題が 4 件、計 6 件の発表が行われ、活発な議論が行われました。

O05-01 森山 裕雅 氏（名古屋大学）

創薬において、タンパク質 / 化合物相互作用（CPI）予測は重要だが、実験的に立体構造が解かれたヒトタンパク質は全体の 14% にとどまる。発表者らは、AlphaFold2 によるタンパク質構造と、ディープラーニングを利用することで、CPI 予測の精度向上を目的とした手法を開発した。

O05-02 吉井 一良 氏（ゼリア新薬工業株式会社）

食事が PK に与える影響について機械学習モデルおよび薬物動態モデルで検討した結果について報告された。質疑応答では、機械学習モデルに利用するデータや薬物動態モデルで予測できないファクターについて議論が行われた。

O05-03 Aigbe Flora 氏（大阪大学）

双極性障害の新しい創薬標的を探索するために、全ゲノムマイクロアレイ、RNAseq トランスクリプトーム、DNA メチル化エピゲノムのデータを統合し、WGCNA や発現差異解析を用いて、新規の双極性障害関連ターゲットの同定を助ける可能性を示した。

O05-04 Holsmoelle Nina 氏（大阪大学）

マスク言語モデル（MLM）を使用することで、静的なタンパク質構造から動的な構造情報などの知識抽出とアミノ酸の局所環境を分類し、タンパク質の相互作用や機能に関する理解を深めることが示された。

O05-05 大曾根 達則 氏（岡山大学）

スケールフリーを前提に開発された WGCNA の問題点を克服する SGCRNA（スペクトルクラスタリングを用いた新しい遺伝子共発現ネットワーク解析ツール）を開発し、従来法よりも高い有用性を示された。口頭発表賞を受賞。

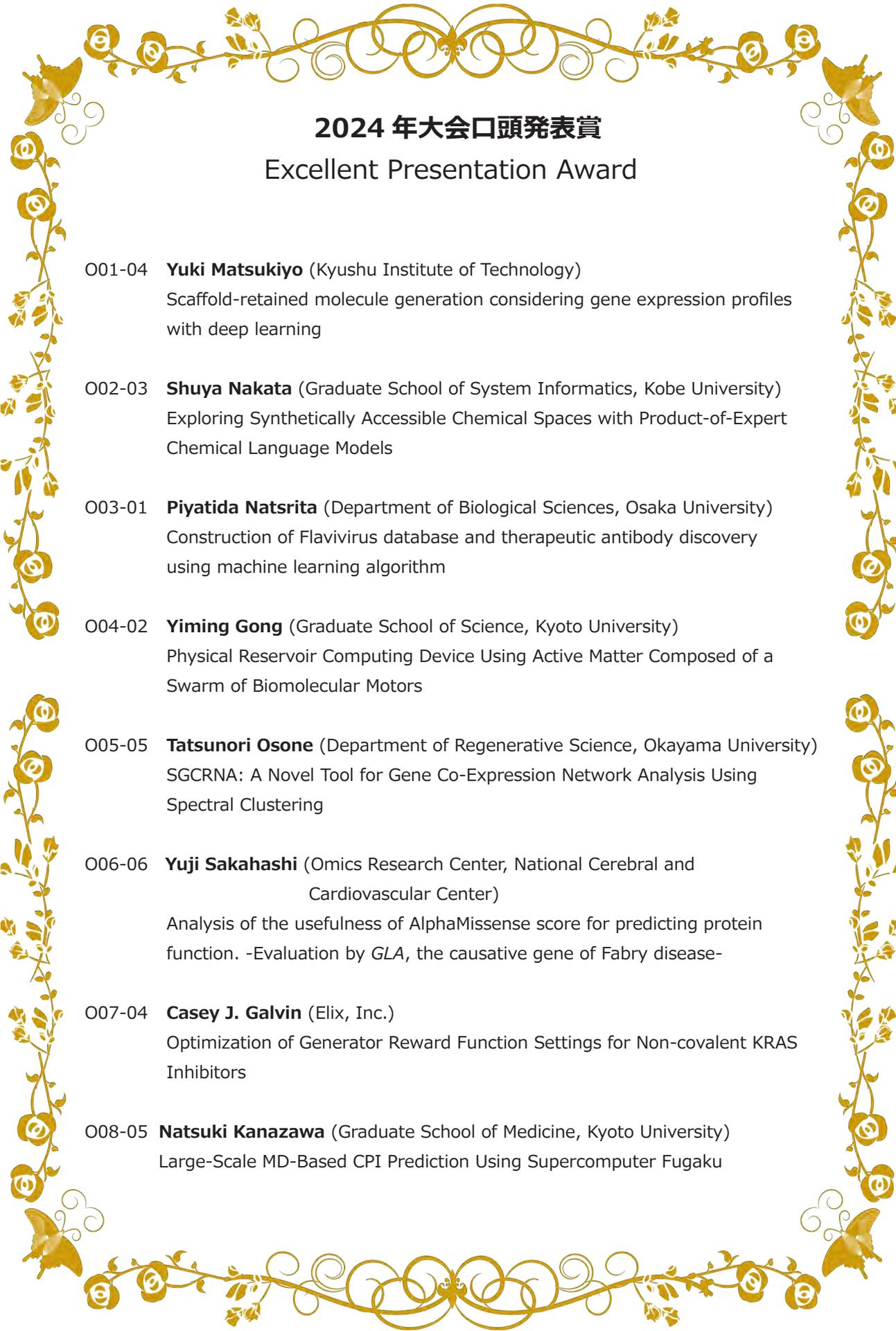
O05-06 渡邊 怜子 氏（大阪大学）

がんの発生に寄与する ARID1A の変異に注目し、タンパク質の発現量とその機能の両方を考慮した革新的な患者層別化戦略の提案、さらに合成致死性を用いた ARID1A の欠損がんに対する新たな治療標的を提案した。

セッション全体を通して概ね 40 名の方にご参加いただき、多様性のあるセッションではあったが本領域への興味の高さを認識することができました。ご講演された先生や参加者の皆様、準備にご尽力いただきました大会関係者、事務局の皆様に改めて感謝申し上げます。



報告：高橋 一敏（味の素株式会社）、
瀧本 征佑（日本たばこ産業株式会社）、
永家 聖（東北大学）



2024 年大会口頭発表賞 Excellent Presentation Award

- 001-04 **Yuki Matsukiyo** (Kyushu Institute of Technology)
Scaffold-retained molecule generation considering gene expression profiles with deep learning
- 002-03 **Shuya Nakata** (Graduate School of System Informatics, Kobe University)
Exploring Synthetically Accessible Chemical Spaces with Product-of-Expert Chemical Language Models
- 003-01 **Piyatida Natsrita** (Department of Biological Sciences, Osaka University)
Construction of Flavivirus database and therapeutic antibody discovery using machine learning algorithm
- 004-02 **Yiming Gong** (Graduate School of Science, Kyoto University)
Physical Reservoir Computing Device Using Active Matter Composed of a Swarm of Biomolecular Motors
- 005-05 **Tatsunori Osone** (Department of Regenerative Science, Okayama University)
SGCRNA: A Novel Tool for Gene Co-Expression Network Analysis Using Spectral Clustering
- 006-06 **Yuji Sakahashi** (Omics Research Center, National Cerebral and Cardiovascular Center)
Analysis of the usefulness of AlphaMissense score for predicting protein function. -Evaluation by *GLA*, the causative gene of Fabry disease-
- 007-04 **Casey J. Galvin** (Elix, Inc.)
Optimization of Generator Reward Function Settings for Non-covalent KRAS Inhibitors
- 008-05 **Natsuki Kanazawa** (Graduate School of Medicine, Kyoto University)
Large-Scale MD-Based CPI Prediction Using Supercomputer Fugaku



2024 年ベストポスター賞 Best Poster Award

- P07-29 **Genki Kudo** (Graduate School of Science and Technology,
University of Tsukuba)
Automated Hit-to-Lead Optimization Using the SINCHO Protocol
and ChemTS



2024 年大会ポスター賞 Excellent Poster Award

- P01-07 **Takashi Yoshidome** (Graduate School of Engineering, Tohoku University)
Deep-Learning model for Predicting the Replacement of Water Molecule
upon Ligand Binding
- P02-13 **Ryosuke Kita** (Department of Applied Chemistry, Kyushu University)
Prediction of quantum mechanical interactions between the ligand and
each amino acid residue in protein-ligand complexes
- P03-06 **Takayuki Serizawa** (Daiichi Sankyo Co., Ltd.)
Development of New data analysis platform for medicinal chemist in
Daiichi Sankyo
- P04-04 **Katsuki Sato** (Department of Chemistry, Tokyo University of Science)
Analysis of HS-AFM images of proteins combining MD simulation and
machine learning
- P05-02 **Yuki Doi** (Mitsubishi Tanabe Pharma Corporation)
Enhancing the Reliability of Machine Learning Predictions through
Quantitative Evaluation of the Applicability Domain: A Case Study of
Multi-Task Prediction Model of Unbound Fraction in Human, Mouse,
and Rat Plasma

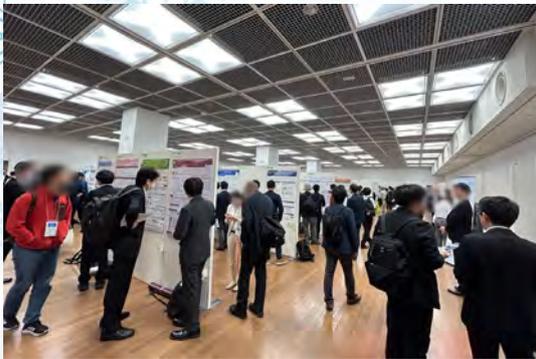
- 
- 
- P06-02 **JUNSOO SONG** (Institute for Protein Research, Osaka University)
A Novel Endometrial Cancer Patient Stratification Considering ARID1A
Protein Expression and Function with Effective Use of Multi-omics Data
- P07-13 **Masami Sako** (Tokyo Institute of Technology)
DiffInt: Integrating Explicit Hydrogen Bond Modeling into Diffusion Models
for Structure-Based Drug Design
- P09-03 **Chung Wing Chan** (Graduate School of Science, Kyoto University)
Anisotropic Swarming of DNA Modified Microtubules Under UV Light
- P10-01 **Yunosuke Matsuda** (Bathclin Corporation)
Decision-making model to enhance subjective well-being through
individualized lifestyle modifications based on counterfactual explanation
- P11-06 **Hiromu Matsumoto** (Graduate School of Engineering, Kyushu University)
Survival Analysis of Chronic Kidney Disease Using Multi-Regional Data
from the LIFE Study



CBI2024
Like! Poster Award

- 
- 
- P04-02 **Shuhei Miyakawa** (Graduate School of Pharmaceutical Sciences,
Osaka University)
Dynamical Interaction Energy Analysis of Elastase in Each Reaction State:
Insights from Molecular Dynamics and Fragment Molecular Orbital
Calculations
- P07-15 **Kaho Akaki** (School of computing, Institute of Science Tokyo)
Acquisition of Bias Information for Protein-Ligand Docking by Mixed-Solvent
Molecular Dynamics

CBI2024 年大会 各会場の様子 (タワーホール船堀)



Hot!!! TOPICS

~最新文献の紹介

深層生成モデルを用いた分子動力学シミュレーションの高速化

中田 柁也

神戸大学大学院 システム情報学研究科

Klein, L.; Foong, A. Y. K.; Fjelde, T. E.; Mlodozieniec, B. K.; Brockschmidt, M.; Nowozin, S.; Noé, F.; Tomioka, R. Timewarp: Transferable Acceleration of Molecular Dynamics by Learning Time-Coarsened Dynamics. *Advances in Neural Information Processing Systems*, **2023**, 36: 52863–52883.

<https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.01170>

分子動力学法 (MD) は、生体分子系の平衡状態や動的性質を理解するために広く使用されるシミュレーション手法である。全原子の MD シミュレーションを安定に実行するためには、時間刻みをフェムト秒 ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) のオーダーに設定する必要がある。一方、タンパク質のフォールディングやリガンド結合など、生物物理学的に重要な過程の多くはミリ秒 ($1 \text{ ms} = 10^{-3} \text{ s}$) 以上の時間スケールで起こる。そのため、これらの過程を MD シミュレーションによってサンプリングするには、膨大な計算コストがかかる。この問題に対して筆者らは、深層生成モデルを用いた MD シミュレーションの高速化手法「Timewarp」を開発した。

Timewarp では、深層生成モデルの一種である Normalizing Flow を用いて、分子系の長時間の時間発展を確率的にモデル化する。具体的には、時刻 t における分子系の原子配置 x_t が与えられたときの τ 秒後の条件付き確率分布 $\mu(x_{t+\tau}|x_t)$ を訓練データから学習する。モデル化する時間発展の長さ τ が長くなるほど分布はより複雑になるが、その分シミュレーションに必要なステップ数を削減することができる。本研究では、 10^5 – 10^6 ステップの MD に相当する時間発展 ($\tau = 0.5$ – $5 \times 10^{-9} \text{ s}$) を学習し、マルコフ連鎖モンテカルロ法の提案分布として使用している。さらに筆者らは、メトロポリス・ヘイスティングス (MH) の採択率に基づき詳細釣り合いを保証することで、漸近的に不偏なボルツマン分布からのサンプリングを実現している。これには、与えられたサンプルの確率密度を容易に評価できるという Normalizing Flow の特性が活用されている。

まず筆者らは、Timewarp をアラニンジペプチドに対して適用し、そのサンプリング能力を検証した。結果として、Timewarp は全ての準安定状態を正しい相対確率でサンプリングし、MD のラマチャンドラプロットを高い精度で再現することができた。さらに、time-lagged independent component analysis (TICA) を用いて求められた準安定状態間の最も遅い遷移のサンプリング効率を、実時間あたりの有効サンプル数 (effective sample size per second of wall-clock time, ESS/s) により定量評価した結果、MD と比較して約 7 倍の向上が確認された。

次に筆者らは、Timewarp を 2 つのアミノ酸からなるジペプチドに対して適用し、訓練に使用されていない新たなジペプチドに対する汎化能力を検証した。その結果、Timewarp が 100 種類のテスト用ジペプチドに対して全ての準安定状態をサンプリングし、MD と比較して中央値で約 5 倍の高速化を達成できることが示された。また、MH による補正を行わない Timewarp の ESS/s を評価した結果、MD と比較して中央値で約 600 倍の向上が確認された。ただし、MH 補正を行わない場合の自由エネルギー推定は、MD による推定と定性的に一致するものの、MH 補正を行う場合よりも精度が低かった。

最後に筆者らは、Timewarp を 4 つのアミノ酸からなるテトラペプチドに対して適用し、より困難な系に対する適用可能性を調べた。その結果、Timewarp が多くのテトラペプチドに対して MD を上回るサンプリング効率を示さないことが明らかになった。一方、MH 補正を行わない Timewarp では、通常の Timewarp や MD が到達できなかったものも含む全ての準安定状態がサンプリングされ、中央値で約 50 倍の高速化が達成された。ただし、この場合の自由エネルギー推定精度はやはり低く、ポテンシャルエネルギーも MH 補正を行う Timewarp や MD と比較してより高い値に分布していた。

これらの結果から筆者らは、より大きな分子へのスケーリングにはさらなる取り組みが必要であるものの、深層学習アルゴリズムの汎化を活用することで MD サンプリングを高速化できる可能性があると結論付けている。本研究は小さなペプチドのみを対象とし、比較も単純な MD に限定されていたが、未知の分子に対する汎化能力とそれによるサンプリング効率の向上を明確に示した点で意義深い。今後は、より大きな分子への適用はもちろん、第一原理 MD の学習や拡張サンプリング手法との融合など、さらなる発展が期待される。



CBI 研究機構 便り

次世代モダリティ研究所 第 11 回次世代モダリティセミナー ～新規 DDS としての LNP～

2024 年 8 月 30 日 (金) オンライン配信

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、「第 11 回次世代モダリティセミナー～新規 DDS としての LNP～」を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、8 月 30 日 (金) にオンライン配信形式で開催した。

今回のセミナーでは「新規 DDS としての LNP」をテーマに東北大学大学院薬学研究科 教授 秋田 英万 氏から「LNP の分子デザインと次世代送達技術としての応用展開」、大阪大学微生物病研究所 /BIKEN 次世代ワクチン協働研究所 特任教授 (常勤) 吉岡 靖雄 氏から「mRNA-LNP ワクチンの新たなる展開」、大阪大学大学院医学系研究科 DDS 製剤開発共同研究講座 特任准教授 松崎 高志 氏から「核酸 LNP 製剤をどう製造するのか」について、それぞれ講演頂いた。

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。

当日のオンライン配信登録者数は 483 社 975 人であった。

-- 記 --

日時：2024 年 8 月 30 日（金） セミナー 14 時 00 分～16 時 30 分

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）

共催：公益財団法人 都市活力研究所

協力：NPO 法人近畿バイオインダストリー振興会議

後援：バイオコミュニティ関西（BioCK）

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 林 憲一 氏

14 時 10 分～14 時 40 分

「LNP の分子デザインと次世代送達技術としての応用展開」

東北大学大学院薬学研究科
教授 秋田 英万 氏

14 時 40 分～15 時 10 分

「mRNA-LNP ワクチンの新たなる展開」

大阪大学微生物病研究所 /BIKEN 次世代ワクチン協働研究所
特任教授（常勤） 吉岡 靖雄 氏

15 時 10 分～15 時 40 分

「核酸 LNP 製剤をどう製造するのか」

大阪大学大学院医学系研究科 DDS 製剤開発共同研究講座
特任准教授 松崎 高志 氏

15 時 40 分～15 時 50 分 「休憩」

15 時 50 分～16 時 25 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

16 時 25 分～16 時 30 分 「閉会の挨拶」

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）
事業部長 林 幾雄 氏

次世代モダリティ研究所 第 12 回次世代モダリティセミナー ～核酸医薬品創出のために必要なこと～

2024 年 11 月 19 日 (火) ライフサイエンスハブウエスト / オンライン配信

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法学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所では、「第 12 回次世代モダリティセミナー～核酸医薬品創出のために必要なこと～」を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、11 月 19 日 (火) にオンライン配信形式で開催した。

今回のセミナーでは「核酸医薬品創出のために必要なこと」をテーマに、国立医薬品食品衛生研究所 遺伝子医薬部長 井上 貴雄 氏から「核酸医薬の開発動向と安全性確保に向けた取り組み」について、国立研究開発法人 国立精神・神経医療研究センター 産学連携顧問 (神経研究所 名誉所長) 武田 伸一 氏から「国産初の核酸医薬品ビルトラルセンの開発」について、味の素 バイオファーマサービス / 株式会社ジーンデザイン プロセス開発研究部 部長 南海 浩一 氏から「長鎖核酸医薬の未来を切り拓く革新的製造ソリューションの提供」について、それぞれご講演いただいた。

また、各講師の講演後、特定非営利活動法人情報計算法学生物学会・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。

当日の出席者は会場が 45 社 51 人、オンライン配信登録者数は 421 社 954 人であった。

-- 記 --

日時：2024 年 11 月 19 日（火） セミナー 14 時 00 分～16 時 30 分
情報交換会 16 時 35 分～17 時 10 分（大阪会場のみ）
会場：ライフサイエンスハブウエスト / オンライン
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）
共催：公益財団法人 都市活力研究所
協力：NPO 法人近畿バイオインダストリー振興会議
後援：バイオコミュニティ関西（BiocK）

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 林 憲一 氏

14 時 10 分～14 時 40 分
「核酸医薬の開発動向と安全性確保に向けた取り組み」
国立医薬品食品衛生研究所
遺伝子医薬部長 井上 貴雄 氏

14 時 40 分～15 時 10 分
「国産初の核酸医薬品ピルトラルセンの開発」
国立研究開発法人 国立精神・神経医療研究センター
産学連携顧問（神経研究所 名誉所長） 武田 伸一 氏

15 時 10 分～15 時 40 分
「長鎖核酸医薬の未来を切り拓く革新的製造ソリューションの提供」
味の素バイオファーマサービス / 株式会社ジーンデザイン
プロセス開発研究部 部長 南海 浩一 氏

15 時 40 分～15 時 50 分 「休憩」

15 時 50 分～16 時 25 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

16 時 25 分～ 16 時 30 分 「閉会の挨拶」

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)

事業部長 林 幾雄 氏

16 時 35 分～ 17 時 10 分 「情報交換会」

講師及び会場参加者





CBI 若手の会コラム (第 12 回)

シリーズ企画「若手の会キャリア (第 9 回)」

「私のキャリアパス紹介」

～日本とドイツ、様々な出会いを通して広がった研究の視点～

市川 彩花

(大阪大学 蛋白質研究所)

はじめに

私は現在、大阪大学蛋白質研究所、細胞システム研究室で助教を務めています。当研究室は、細胞の増殖や分化などの運命制御を対象とし、定量的な生物学実験と数理モデル、オミクス解析などの計算・情報科学、さらに自然言語処理技術などを組み合わせることで、シグナル伝達ネットワークの解明を目指しています。私は、特に乳がん細胞の細胞周期に着目し、その制御機構と抗がん剤応答の分子メカニズムなどを研究し、5 年目を迎えました。当初、寄稿のご依頼をいただいた際、本シリーズに登場された諸先輩方と比べると、まだまだ若輩者であり、人生の参考になるような話はお伝えできないのではないかと思います。一方で、寄稿にあたり、自身のキャリアを振り返ってみると、多くの方々との出会いが今の私を形成していることを改めて実感しました。そこで、感謝の思いを込めて、拙稿をしたためることにしました。どうぞ一読頂けますと幸いです。

これまでの軌跡

 学位：2017 年 博士 (農学) 京都大学大学院農学研究科

経歴：

2017 年 独国 University Hospital Heidelberg, Institute of Pathology 研究員

2018 年 独国 Molecular Health 社 External consultant

2019～2020 年 大阪大学 蛋白質研究所 特任研究員

2020 年～ 同上 助教

先生に背中を押されアカデミアの道へ

私が本格的に生物学の研究の道を志したのは、大学 3 回生の秋頃でした。もともと、高校生の時に生物の授業に一番の面白みを感じていたことから、大学進学では、生物学を広く学ぶことができ、バイオテクノロジーの研究が盛んな山口大学農学部を選びました。大学 3 回生の夏頃に動物細胞のアポトーシスを観察する学生実験があり、そこから細胞の運命決定について関心を抱くようになりました。特に、正常細胞が本来の運命から逸脱し、「がん」の方向へと進むメカニズムに興味を持ちました。間違いなく、あの学生実験が自身の進路を決める大きなターニングポイントであったと同時に、今の研究テーマは、当時のナイーブな興味に回帰していると言えます。

これから始める研究活動に期待を膨らませる一方で、いざアカデミアを自分の将来の選択肢として考えてみると、当時在籍していた学科の教員で女性は 1 人、他は男性という状況に気が付きました。今から 15 年くらい前のことですが、学科の同級生の男女比はおおよそ 1 : 1 であるのに、教員の男女比は明らかに不均衡でした。日本で女性がアカデミアに残って活躍するのは厳しいのだろうか？と不安に思ったことを今でも覚えています。そのような折に、山口大学医学部で講師をしておられた徳田 信子先生 (現、獨協医科大学医学部教授) とお話しさせていただく機会がありました。徳田先生の研究室では、女性の教員や研究

員が多く在室していました。「結婚や出産を考えると、女性がアカデミアで研究を続けることは難しいでしょうか？」と不寐に尋ねたところ、「今度、産休から〇〇先生が帰ってくるし、この間は〇〇先生も産前でお腹が大きかったけれど、颯爽と坂から自転車で降りてきて元気よく声をかけてくれたよ」と教えていただきました。本当に研究が好きであれば、場所を問わず、たとえどのようなライフイベントがあっても続けられる、と強く背中を押していただきました。この会話が、アカデミアの道に進む大きな契機となりました。

山口と京都、研究への興味を引き出していただいた恩師との出会い

卒業研究配属では、山口大学医学系研究科の山田 守教授（現、創成科学研究科教授）の情報生化学研究室を選択しました。大腸菌を長期培養し、過酷な環境に晒した場合の外部変化に応答する細胞の形態変化や遺伝子変異への影響を解析しました。長期培養の過程では、増殖と同時に、代謝の変化や細胞死などの様々な運命が集団レベルでダイナミックに変化します。この全体として非常に複雑な現象を理解するためには、集団レベルに加えて、一細胞レベルでの解析やシステム生物学的なアプローチも必要でした。実はこの時、研究室で山田先生と議論をさせていただく中で感じた面白いコンセプトや湧いた疑問が、現在所属する研究室を選択した理由にもつながっています。

山田先生の指導を仰ぎながら毎日大腸菌と格闘し、楽しく研究を続けていましたが、がんに関する興味が消えることはありませんでした。原核細胞で研究を進めるにつれ、動物細胞では細胞外の環境をどのように感知し、自身の運命を決定しているのだろうかという疑問が浮かびました。がん細胞が足場非依存性の増殖を示すことを知り、細胞が細胞外基質に接着するメカニズムを研究すれば、がんの理解につながるのではないだろうかと考えました。そうして研究室を探し、京都大学大学院農学研究科、細胞生化学研究室の木岡 紀幸准教授（現、教授）の指導を仰ぐことになりました。

木岡先生のもとでは、修士から博士課程まで、分子生物学や生化学、細胞生物学的なアプローチを駆使した研究に取り組みました。今では細胞が細胞外環境の物理的因子を感知することは公知ですが、当時はまだまだ謎が多かった、動物細胞が足場の硬さに応答する仕組みについての研究テーマをいただきました。なかなか思うように結果が出ないこともありましたが、最終的に、コラーゲンなどとの接着に必要なタンパク質複合体と、細胞膜上の脂質ドメインの相互作用が、硬さ応答に必須であることを明らかにしました。指導教官の木岡先生をはじめ、同研究室の植田 和光教授（現、高等研究院特定拠点教授）や当時の研究室メンバーには、感謝してもしきれないほど、ご指導いただきました。

学生としての研究生活を通して、自分の漠然とした興味を、計測と検証が可能な学問研究として落とし込むことの大切さを学びました。学生のうちは、ともしれば頭でっかちに、あれやこれやとやってみてみたいことが広がるものですが、本会「情報計算化学生物」の通り、生物の持つ情報を定量、計算し、化学と生物学実験によって証明することが私たちの本分です。こうした考え方が、先生方や研究室のメンバーとの議論によって築き上げられたものであることは間違いありません。

ドイツへの留学

こうした先生方との出会いに加えて、研究室では夫とも出会うことになりました。私たちは博士課程の時に学生結婚し、ふたりとも博士号取得後はポスドクとして研究を続けたいと考えていました。結果的に夫の方が先にドイツ、ハイデルベルグにある欧州分子生物学研究所 (EMBL) への留学が決まりました。ハイデルベルグ市は EMBL に加え、ハイデルベルグ大学やドイツがん研究センター (DKFZ)、さらにバイオベンチャーも多く存在する非常に学際的な都市で、また、ドイツの中でも、世界中から様々な国と地域の人々が集まる国際的な街です。私は、その多様性に富んだ雰囲気惹かれ、ドイツで就活することを決意しました。EMBL で開催されていた国際会議での発表に合わせて、あちこちで研究室訪問を行い、学位取得後すぐ 2017 年の夏からハイデルベルグ大学病院の病理学研究所で肝臓がんの研究をされている Stephanie Roessler 先生の研究室でポスドクとして働きはじめました。

Roessler 先生の下での研究は、大学院で繊維芽細胞や上皮細胞を用いて取り組んでいたタンパク質 SORBS3 (vinexin) の機能解析を発展させるものでした。大学病院で手に入る肝臓がん患者の検体や肝臓がん細胞株を用いて、新たに炎症反応との関連を研究することになりました。Roessler 先生は肝臓がんを研究しているうちに、予後マーカーとしての SORBS3 に出会い、偶然に私が応募してきたのでした。当然、先生からは大きな期待をかけていただいたのですが、私にとってはこれまでの経験と先入観により、徐々にテーマが煮詰まる状況が続きました。当時のことを振り返ると、研究の視野が非常に狭くなっていたと

思います。結局一年も経たずして、自分を全く新しい環境に置きたいと考えるようになり、研究室を辞めることにしました。無論、Roessler 先生や彼女の研究室メンバーにはとても親身に接していただいていたので、自分への不甲斐なさが残りました。

多くの支援を受けて、精密医療を実践するドイツ企業へ

いざ研究室を辞めたものの、その時点で夫は少なくとも 2 年はハイデルベルグに在る予定でした。職探しのために片っ端からあちこちの研究室のボス宛にメールを書きましたが、一向にオファーをもらえませんでした。これは後で冷静になって納得したのですが、国際的に人気の都市において、家族の都合で滞在している外国人を雇ってあげようというお人好しは多くありません。予算が潤沢な研究室であれば、世界中から応募が来る激戦ですし、余裕がなければ見向きもされないわけです。そういうわけで、自分では如何とも打開できない日々が続きました。

幸いにも、ハイデルベルグでは人に恵まれました。京都大学の欧州拠点がハイデルベルグにある関係で、ハイデルベルグ大学内に、いまでも交流が続くような友人ができました。また、夫の職場の同僚たちが常に心配してくれ、よく食事を一緒にしました。そんなある日、同僚の一人から、がん患者のための精密医療（プレジジョン・メディシン）用ソフトウェアを開発している会社、Molecular Health 社の求人説明会があるという情報をいただきました。私は、がん研究の成果を社会に還元することにも強い関心があったので、会社の目指す方向性や彼らの成果に惹かれました。説明会後に採用人事にメールを送り、面接の機会を得ました。海外はおろか日本でも経験のない企業採用面接です。企業で働いているドイツ人やフランス人の友人に面接のアドバイスをいただき、EMBL ではセミナー室をこっそり借りて夫の同僚たちに模擬面接までしていただきました。大変なお力添えのおかげで面接はうまくいき、人生で初めて企業で働くことになりました。上司や同僚の仕事ぶりに大いに刺激を受け、毎日が新鮮で貴重な経験でした。

アカデミアでシステム生物学分野に挑戦

入社してから半年ほど経過した頃、私が担当していた案件がうまくいったという報告を受けました。そして、正社員として数年規模の大きなビジネスプロジェクトのために働き続ける意欲があるか打診されました。思いがけない提案に、その場面ではすぐに回答できませんでした。実は、勤め出してから網羅的遺伝子解析に関する論文を読み勉強を進めるうちに、色々なアイデアが頭の中に浮かび、いつかまたアカデミアでの基礎研究に戻りたいと思っていたからです。会社のエネルギーな空気によって、学問的探究心も同時に呼び起こされていました。夫とよく話し合った結果、私は、Molecular Health 社でのキャリアではなく、一人ででも先に日本に帰り、もう一度アカデミアに戻って研究をすることを選びました。

日本に帰るにあたり、がん、運命決定、遺伝子発現解析などの、私にとって重要なキーワードで、一から受け入れ先を探しました。幸いにも、2019 年 10 月から岡田 眞里子教授が主宰する現在の研究室に参加させていただくことができました。この選択に、学生時代からドイツ時代までの全ての経験が影響したことは言うまでもなく、システム生物学の分野にはじめて本格的に挑戦しています。大学 4 回生の当時、研究室では大腸菌の代謝経路や細胞死に向かうシグナル経路を数理モデル化する試みがありましたが、結局時間もなく、私は関わるできませんでした。その後、約 8 年の間に、ハイデルベルグ大学のセミナーや、Molecular Health 社で情報科学・計算の手法に触れたことで、システム生物学への関心が急激に高まっていました。これまでの私の研究キャリアにおける全ての出会いによって、必然的に導かれたように感じています。

細胞システム研究室では、細胞の様々な運命制御について、定量的な実験データや公共の大規模データを使いながら、タンパク質のキネティクスおよび動態変化を数理的に理解することを目指しています。私のテーマである、乳がん細胞の細胞周期のモデル構築には、得意とする生物学実験に加え、新たに情報科学を学ぶ必要があります。学部 4 回生の時にシステム生物分野で学んだコンセプトや疑問と再び向き合う機会が得られたことも含め、この研究環境に身を置くことができていることは、望外の喜びです。



日々の挑戦

現在、私が在籍する細胞システム研究室では、国籍や研究のバックグラウンドが異なる多様な人々が集まっています。それぞれの研究テーマも、一人ひとりが独立したテーマに取り組んでいます。初めて研究室の進捗ミーティングに参加した際、恥ずかしながら数理系の研究テーマについていけず、自分が無力に感じました。また、数学の知識を持つ研究者との議論では、相手の考えを理解するのに時間がかかることもありました。しかし、岡田先生はそれぞれ異なる背景を持つメンバーとしっかり議論をされており、当初、なぜそのようなことができるのか不思議に思っていました。研究室で過ごすにつれ、岡田先生が日々、様々な方向から物事を観察し、研究者同士が積極的に議論できる場を作っていること、そして日頃からそうした習慣を作ることで、議論が可能になっていることに気づきました。これにより、国内外問わず多様な分野の研究者が自然と集まり、活発な議論の雰囲気生まれているのだと実感しました。岡田先生が「人材と知識の両面で多様性を大事にしている」とおっしゃっていた言葉が、まさに研究室で実現されているのを感じます。

そのような環境で、自分が普段触れていない学問分野に出会うたびに、良い意味で自分にプレッシャーがかかりますが、情報科学や数理手法を取り入れながら、日々挑戦し、研究に取り組んでいます。さらに現在、助教として教育に携わる中で、岡田先生の研究への取り組み方や研究室の運営方針はとても参考にさせていただいています。アカデミアにおける女性教員はまだ少ない状況ですが、私にとって、岡田先生のような女性教員のロールモデルが身近にいることは本当に有難いことだと感じています。今後、学生をしっかり支える立場になれるよう、気を引き締めて教育活動にも力を入れているところです。

アカデミアでの研究中断期間の捉え方

アカデミアから離れている期間がある場合、科研費など研究費の申請時には、研究中断期間を記載し申告します。中断期間は、確かにアカデミアでの業績は何もなくなります。しかし、中断していても、その間に自身が得た興味や物事、仕事に対し真剣に向き合っていれば、それは先の自身のキャリアにつながると信じています。本当にどのようなことに取り組みたいのか？それが企業でもアカデミアでも、自分の本心に従って場所を選ぶことが、それ以降の仕事のモチベーションにつながります。また、その中断期間に出会った人たちと引き続き交流することも重要だと感じています。相手も自身のキャリアに従って考え方が当時とは変わりますし、話してみると偶然、自分と一緒にのことを考えていたということもありました。実際に、当時ハイデルベルグで出会った友人とは、今も連絡をとり続けており、将来的に何らかの形で一緒に仕事ができることを期待しています。

今後の抱負

これまで進めてきた研究を振り返ってみると、私は間違いなく実験生物学者であり、常日頃からいかにして実験的に仮説を検証できるかということを念頭に置いています。昨今では一細胞トランスクリプトーム解析、メタボローム解析、プロテオーム解析など、膨大な量の生命情報を取得することが容易になり、研究者はそれらの情報に圧倒される日々です。この膨大な情報の海を、実験という名のオールで漕ぎ分けていくことが、実験生物学者として育てられたこれまでの厚恩に報いることではないかと考えています。同時に、この海を見渡すために引き続き、情報科学を学んでいきたいと思っています。本会「情報計算化学生物学会」の分野は今後の科学の発展において必須であり、私個人、皆様のご指導を賜ると共に微力ながら貢献していきたいと考えております。

謝辞

改めて自身のキャリアパスを振り返ることで、これまで多くの人と出会い、支えられたことで、私のなかに日々新しい視点が生まれ、キャリアが繋がってきたことを再確認しました。私に関わる全ての方々、特に夫や両親、家族、そして研究室で毎日顔を合わせるメンバーに心より感謝を申し上げます。毎日、充実した研究生を送ることができている今の状況に感謝しながら、今後も研究に励みたいと思います。

今回、CBI 若手の会の方との素敵なお縁で、こちらのコラムのお話をいただきました。貴重な機会をいただきまして、誠にありがとうございます。末筆ながら、本会の益々のご発展をお祈り申し上げます。





CBI 若手の会コラム担当通信

今回は大阪大学蛋白質研究所の市川彩花先生に「私のキャリアパス～日本とドイツ、様々な出会いを通して広がった研究の視点～」のタイトルで寄稿して頂きました。様々な経験により多彩な知識を得つつ、軸はぶれずに上手く組み合わせることの重要性を感じます。また、周囲の女性研究者について触れられていることも興味深いです。

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 2025 年 3 月発行の第 13 巻第 1 号にて特別企画「気になるツールを使ってみよう」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 | (株式会社ウイズメーティス) |
| 高橋 一敏 | (味の素株式会社) |
| 渡邊 怜子 | (大阪大学) |
| 朴 鐘旭 | (医薬基盤健康栄養研究所) |

講演会 報告・予告

第 458 回 CBI 学会 講演会

「創薬の多様化に対応するタンパク質構造観察技術の進化」

日時：2024 年 8 月 19 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：木下 誉富（大阪公立大学）、田中 成典（神戸大学）、植松 直也（大塚製薬株式会社）

主催：CBI 学会関西西部会

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:05 世話人挨拶
- (2) 13:05 - 13:45 「希少がん治療のためのヒット化合物獲得まで～ unstructured protein を相手に～」
岩崎 憲治（筑波大学）
- (3) 13:45 - 14:15 「放射光タンパク質結晶構造解析 測定・解析最前線」
平田邦生（理研播磨）
- (4) 14:15 - 14:45 「溶液中分子観察により見出された蛋白質の運動性と機能相関
最近の電子回折によるナノ結晶解析例」
松本 崇（株式会社リガク）
- (5) 14:55 - 15:35 「AI によるタンパク質構造予測と創薬支援計算」
大上 雅史（東京工業大学）
- (6) 15:35 - 16:15 「計算機を用いたタンパク質の設計・改造」
小杉 貴洋（分子科学研究所）
- (7) 16:15 - 16:55 「MD シミュレーションによる創薬研究」
森次 圭（大阪公立大学）
- (8) 16:55 - 17:25 パネルディスカッション
- (9) 17:25 - 17:30 世話人挨拶

開催報告：

生理学的研究の進歩とともに、生体分子は想像以上に複雑に制御され、さらに生体内での構造多型あるいは動的挙動が制御のカギを握ることが明らかとなってきました。これら生体作用の分子メカニズムを理解し、医薬品開発へと繋げていくためには、創薬標的分子の構造を高精度に見ること、理解することが肝要となります。本講演会では、実験系構造解析、コンピューティング構造解析、動的構造解析分野の 6 名の先生方をお招きして、最新技術と創薬応用への可能性などについて御講演いただきました。

岩崎 憲治先生（筑波大）には、従来の SBDD の概念では太刀打ちできない unstructured protein を創薬標的分子として、クライオ電子顕微鏡や、生化学、細胞生物学、NMR、高速 AFM、ハイスループットスクリーニング系の構築、患者さんとの対話まで、本気の創薬へ「化学」の眼で取り組んでいる研究をご紹介します。

平田 邦生先生（理研播磨）には、放射光を利用したタンパク質結晶構造解析は自動測定により測定効率・精度は劇的に向上したこと、大量データの階層的クラスタリングを利用して構造多型かつ生物学的に重要な構造情報をデータ分類により見出す方法について、新たな展開を交えてご解説いただきました。

松本 崇先生（リガク）には、蛋白質は溶液中で柔軟に揺らいでおり、蛋白質機能を詳細に理解する為には、溶液中の分子観察が重要である。一方、結晶構造解析の分野では、これまで X 線では対象とならなかったナノサイズ結晶の構造解析に対する要望が増している。これらを踏まえて、新たに開発した溶液中の分子観察手法に基づく蛋白質の運動性、電子回折によるナノ結晶の構造解析例をご紹介します。

大上 雅史先生（東工大（当時））には、複合体構造予測（AlphaFold-Multimer）、タンパク質 - ペプチドドッキング予測、人工タンパク質設計（AfDesign）、リガンド当てはめ（AlphaFill）など、AlphaFold をベースとした予測技術の急速な発展を遂げていることを踏まえ、情報学・AI が分子設計・創薬へもたらす革新の可能性について、さらに先生の研究成果をご紹介いただきました。

小杉 貴洋先生（分子研）には、計算機を用いたタンパク質設計手法が発展し、天然にはない新しいタンパク質を創る、天然のタンパク質を合理的に改造するといったタンパク質設計はどのように行われているのか、自らのご研究をもとにご紹介いただきました。

森次 圭先生（大阪公立大）には、生体分子の構造変化パスを効率的に探索する「重み付きアンサンブル法」を適用した最近の応用研究について、また、データベースにある立体構造をすべて収集し MD シミュレーションと組み合わせる「crystal structure ensemble」の手法についてご紹介いただきました。

それぞれの先生方のご講演の後にパネルディスカッションの時間を設け、生体作用の分子メカニズムを理解し、医薬品開発へと繋げていくために、それぞれのお立場から意見交換をしていただきました。実験系とインシリコ系の融合が進めば、さらに高精度な構造理解が可能となるとの共通理解でした。

本講演会はオンライン開催で、当日 230 名の方にご参加いただきました。お忙しい中、本講演会におけるご講演をご快諾いただきました講師の先生方、本講演会開催をサポートしていただいた CBI 学会関係者の皆様とご参加いただいた皆様に深く感謝申し上げます。

（世話人一同）



岩崎 憲治 先生



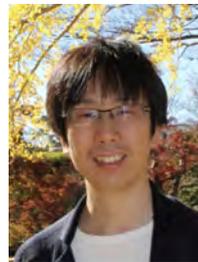
平田 邦生 先生



松本 崇 先生



大上 雅史 先生



小杉 貴洋 先生



森次 圭 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 461 回 CBI 学会講演会

「Well-being、Healthy Aging を実現するための街づくり」

日程：2025 年 1 月 30 日（木）

場所：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）、茂木 正樹（愛媛大学）、市川 治（住友ファーマ株式会社）

第 462 回 CBI 学会講演会

「ゲノム編集の最先端と遺伝子治療の展望」

日程：2025 年 2 月 7 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：長谷川 清（テクノプロ・R&D 社）、佐藤 太郎（杏林製薬株式会社）、

鈴木 達也（大鵬薬品工業株式会社）、狩野 敦（株式会社モルシス）、東田 欣也（株式会社モルシス）

第 463 回 CBI 学会講演会

「分子シミュレーションの最新動向 ～構造・ダイナミクス解析から機能解析まで～」

日程：2025 年 3 月 14 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：小久保 裕功（中外製薬株式会社）、増田 友秀（東レ株式会社）、

谷村 直樹（みずほリサーチ & テクノロジー株式会社）、天野 靖士（アステラス製薬株式会社）

委員会開催報告

創薬研究会運営委員会

第 66 回創薬研究会運営委員会

日時：2024 年 9 月 19 日 (木) 10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

第 67 回創薬研究会運営委員会

日時：2024 年 12 月 13 日 (金) 10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

関西部会運営委員会

日時：2024 年 11 月 20 日 (水) 15:00 - 17:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

執行部会

第 107 回執行部会

日時：2024 年 9 月 25 日 (水) 18:00 - 19:00

場所：CBI 学会事務局 (東京都港区芝浦 3-11-1 キョウワクリエイト第一ビル 3 階)
Zoom 会議

第 108 回執行部会

日時：2024 年 11 月 26 日 (火) 18:00 - 19:00

場所：CBI 学会事務局 (東京都港区芝浦 3-11-1 キョウワクリエイト第一ビル 3 階)
Zoom 会議

CBI ジャーナル編集委員会

分野長会議 第二回

日時：2024 年 9 月 25 日 (月) 10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

分野長会議 第三回

日時：2024 年 12 月 6 日 (水) 11:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

CBI 学会誌編集委員会

2024 年第 4 回編集委員会

日時：2024 年 9 月 13 日 (月) 9:00 - 10:00
場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

CBI 研究機構

第 42 回運営会議

日時：2024 年 9 月 19 日 (木) 9:00 - 10:00
場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

第 43 回運営会議

日時：2024 年 10 月 7 日 (月) 9:00 - 10:00
場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

第 44 回運営会議

日時：2024 年 11 月 25 日 (月) 9:00 - 10:00
場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

2024 年大会実行委員会

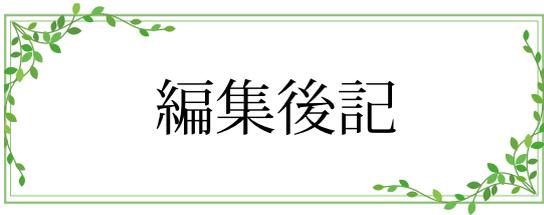
第 8 回 2024 年大会実行委員会

日時：2024 年 9 月 24 日 (火) 14:00 - 15:00
場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

2024 年大会プログラム委員会

第 9 回 2024 年大会拡大プログラム委員会

日時：2024 年 9 月 24 日 (火) 15:00 - 16:00
場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議



編集後記

今年は昭和で数えると 99 年、節目の年がもう直ぐ終わろうとしています。「降る雪や明治は遠くなりけり」と詠まれたのは昭和 6 年だそうですが、昭和も遠くなったものです。

さて、昨年同様今年の大会特集も今号と次号、2 回に分けての掲載となります。今年の大会も非常に多くの方々にご参加いただき、ポスター発表の盛況さはパンデミックを遠く感じるほどでした。毎年のことですが、学会運営に携わった先生方、座長の皆様には学会誌への報告の寄稿を賜り、心より御礼を申し上げます。(Y. T.)

CBI 学会誌 第 12 卷 第 4 号

2024 年 12 月 15 日発刊

CBI 学会誌編集委員会：

編集委員長 水間 俊 (帝京平成大学薬学部)
副編集委員長 高岡 雄司 (シュレーディングー株式会社)
編集委員 江崎 剛史 (滋賀大学)
熊澤 啓子 (帝人ファーマ株式会社)
高橋 一敏 (味の素株式会社)
朴 鐘旭 (株式会社明治/医薬基盤・健康・栄養研究所)
渡邊 博文 (株式会社ウイズメーティス)
渡邊 怜子 (大阪大学蛋白質研究所)

制作：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。

