

CBI学会2020年大会

Chem-Bio Informatics Society(CBI) Annual Meeting 2020

科学実験の自動化が拓く AI時代の創薬研究

*Robotic Laboratory Automation of
Drug Discovery Research in the AI Era*

会期:2020年10月27日(火)-30日(金)

WEB配信によるオンライン開催



情報計算化学生物学会(CBI学会)

CBI 学会 2020 年大会

＜オンライン開催＞

科学実験の自動化が拓く AI 時代の創薬研究

会期：2020 年 10 月 27 日(火)－30 日(金)

CBI 学会 2020 年大会

大会長：夏目 徹（産業技術総合研究所）

実行委員長：石原 司（産業技術総合研究所）

Chem-Bio Informatics Society (CBI)
ONLINE Annual Meeting 2020

“ Robotic Laboratory Automation of Drug Discovery Research in the AI Era ”

Dates: October 27 (Tue) – 30 (Fri), 2020

Conference Chairperson

Toru Natsume (AIST)

Organizing Chairperson

Tsukasa Ishihara (AIST)

CBI 学会 2020 年大会事務局

Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2020 Secretariat

10月27日(火)【1日目】

日付	時間	チャンネル1 (CH1)	チャンネル2 (CH2)
10月27日(火)	10:00-10:10	開会式、会長挨拶	
	10:10 10:30	<大会長講演> 座長：片倉 晋一（慶應義塾大学） K-01 夏目 徹 （産業技術総合研究所） 「ロボットと人工知能で拓くライフサイエンスの未来」	
	10:30 12:00	<プレナリー講演>『ラボオートメーションとビッグデータが開く創薬の未来』 座長：片倉 晋一（慶應義塾大学） K-02 高橋 恒一 （理化学研究所） 「ロボティック・バイオロジーによる生命科学の加速」 K-03 谷嶋 成樹 （三菱スペース・ソフトウェア㈱） 「実臨床がんゲノムデータベースによる全がん種に跨る大規模な患者層別化の試み」	
	12:00-13:00		
	13:00 14:30	<企業セッション> ES-01 株式会社ワールドフュージョン 『創薬ビッグデータを利用した予測と解析』 緑川 淳 （㈱ワールドフュージョン） 「創薬候補となる化合物やターゲットを効率良く探し出すソフトウェア LSKB」 「LSKBを応用した製品やサービスのご紹介」 「ターゲット副作用予測による化合物の最適化 CHEMOTARGETS CLARITY」 牧野 浩美 （㈱ワールドフュージョン） 「基礎研究からトランスレーショナルリサーチまで 総合管理プラットフォーム SAPIO Exemplar LIMS」	<企業セッション> ES-02 ドットマティクス株式会社 『多様化する生物学的製剤の開発を支援するインフォマティクス・プラットフォーム』 福山 隆 （ドットマティクス㈱）
	14:45 16:15	<招待講演>『ロボット実験・自動解析が加速するイノベーション』 座長：光山 統泰（産業技術総合研究所） I-01 紀ノ岡 正博 （大阪大学） 「細胞を育む技術」 I-02 蓮沼 誠久 （神戸大学） 「代謝設計に資するハイスループットプラットフォームの開発による微生物スマートセルの構築」 I-03 上田 昌宏 （大阪大学／理化学研究所） 「細胞内1分子イメージング解析の自動化と細胞内シグナル伝達への適用」	<シンポジウム> SP-01 国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構（JAXA） 『宇宙育ちの高品質タンパク質結晶から得られた成果』 モデレーター： 吉崎 泉 （宇宙航空研究開発機構） 山田 貢 （宇宙航空研究開発機構） 講師： 日高 興士 （神戸学院大学） 「細菌DPP7のX線構造を利用した抗菌ジペプチドの開発」 小松 晃之 （中央大学） 「人工酸素運搬体（赤血球代替物）の開発」 藤井 郁雄 （大阪府立大学） 「ポスト抗体医薬：分子標的HLHペプチドを基盤とした新しい創薬モダリティの開発」
	16:30 18:00	<招待講演>『構造生物学・シミュレーションの進化が魅せる相互作用』 座長：上村 みどり（帝人ファーマ㈱） I-04 濡木 理 （東京大学） 「クライオ電子顕微鏡解析で見えてきた膜タンパク質の分子機構」 I-05 杉田 有治 （理化学研究所） 「細胞環境はどのようにタンパク質の構造、ダイナミクス、機能に影響を与えるか？」	<スポンサードセッション> SS-01 アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社 『創薬領域での自動化×AI研究手法』 田村 明敏 （大日本住友製薬㈱） 「大日本住友製薬の創薬研究におけるAWS活用事例」 小泉 秀徳 （アマゾン ウェブ サービス ジャパン㈱） 「AWSを活用した自動化×AIソリューション」

10月27日(火)【1日目】

日付	時間	チャンネル3 (CH3)	チャンネル4 (CH4)	チャンネル5 (CH5)
10月27日(火)	10:00-10:10			
	10:10 10:30			
	10:30 12:00			
	12:00-13:00			
	13:00 14:30	<企業セッション> ES-03 バトコア株式会社 『化合物デザインのプラットフォームDesign Hub』 『合成展開ナレッジ活用プラットフォームTransformer 2』 安倍 雄一郎 (バトコア株)	<企業セッション> ES-04 ブルカージャパン株式会社 『次世代研究情報管理システムArxspanのご紹介』 宇佐 明人 (ブルカージャパン株)	<企業セッション> ES-05 DKSHジャパン株式会社 『helix® - a next generation modular biosensor for interaction and conformational analysis』 Ulrich Rant (Dynamic Biosensors GmbH)
	14:45 16:15	<シンポジウム> SP-02 国立研究開発法人 日本医療研究開発機構 (AMED) 『COVID-19感染症治療薬創製のためのAMED-BINDSの取り組み』 モデレーター： 善光 龍哉 (AMED) 講師： 前仲 勝実 (北海道大学) 「COVID-19 対策の創薬開発へ向けた北大創薬科学研究教育センターの取り組み」 津本 浩平 (東京大学医科学研究所) 「相互作用の熱力学的解析とCOVID-19」 広川 貴次 (産業技術総合研究所) 「ドラッグリポジショニングを活用したCOVID-19 治療薬のインシリコ創薬支援」 渡士 幸一 (国立感染症研究所) 「新型コロナウイルス感染実験からの増殖阻害薬の同定」	<フォーカストセッション> FS-01 先端的計測技術 (1) モデレーター： 石田 誠一 (国立医薬品食衛生研究所, 崇城大学生物生命学部) 多田 尚史 (上海科技大学生命学院) 藤田 聡史 (産業技術総合研究所) 講師： 松本 雅記 (新潟大学大学院医歯学総合研究科) 「ペプチド先導型プロテオミクス～精密で信頼性の高いタンパク質定量技術～」 和泉 自泰 (九州大学生体防御医学研究所) 「ナノ液体クロマトグラフィー質量分析を基盤としたシングルセル分子フェノタイプ解析」 高山 祐三 (産業技術総合研究所) 「自律神経を備えたヒト培養組織の構築とその応用」	<フォーカストセッション> FS-02 生命の起源：化学反応と情報 モデレーター： 田中 成典 (神戸大学) 講師： 古川 善博 (東北大学) 「隕石と生命分子の起源」 島村 孝平 (熊本大学) 「計算機シミュレーションを用いた生命起源研究」
	16:30 18:00	<シンポジウム> SP-03 『AMED/BINDSインシリコユニットにおける創薬支援研究』 モデレーター： 広川 貴次 (産業技術総合研究所) 講師： 金谷 重彦 (奈良先端科学技術大学院大学) 「コロナ禍にめげず天然物データベース(KNApSack)の充実を図りアンチコロナ活性を目指す」 太田 元規 (名古屋大学) 「液滴を形成する天然変性タンパク質」 Daron M Standley (大阪大学) "High-throughput structural modeling of immune receptors" 白井 剛 (長浜バイオ大学) 「機械学習による疾患-タンパク質-ドラッグネットワークの解析」	<フォーカストセッション> FS-01 先端的計測技術 (2) 講師： 高橋 賢 (岡山大学大学院医歯薬学総合研究科) 「ヒト臓器チップを用いた臓器機能評価」 高山 和雄 (京都大学IPS細胞研究所) 「ヒト肺モデルの構築とCOVID-19研究への応用」 江尻 洋子 (Mimetas Japan株式会社) 「Organ-on-a-Chipのハイスループットスクリーニングへの展開」	

10月28日(水)【2日目】

日付	時間	チャンネル1 (CH1)	チャンネル2 (CH2)
10月28日(水)	10:00 12:00	<プレナリー講演>『人工知能 (AI) の発展と融合によるスマートラボへ』 座長：高橋 恒一 (理化学研究所) K-04 谷川 民生 (産業技術総合研究所) 「スマートラボへの実現に向けたAI、ロボット技術」 K-05 本間 光貴 (理化学研究所) 「LINC 3年間のチャレンジとpost LINCに向けた課題」 K-06 吉田 亮 (統計数理研究所) 「マテリアルズインフォマティクス：機械学習による設計と合成の自動化」	
	12:00- 13:00		
	13:00 14:30	<企業セッション> ES-06 株式会社モルシス 『創薬モダリティの多様性に対応した製品のご紹介』 池上 貴史 (株)モルシス 「統合計算化学システムMOE」 篠崎 康裕 (株)モルシス 「研究情報管理統合プラットフォーム Scilligence」 東田 欣也 (株)モルシス 「医薬品の安全性情報ポータル OFF-X」	<企業セッション> ES-07 株式会社Elix 『ディープラーニング(AI) の最先端技術を創薬に応用 -AI創薬支援サービス- 』 結城 伸哉 (株)Elix 「Elix における AI 創薬事業紹介と最新研究動向」 Nazim Medzhidov (株)Elix "Predicting inhibitors for SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA polymerase using machine learning" Jun Jin Choong (株)Elix "Generative Models for Molecular Design" ROMEO COZAC (株)Elix "Deep Learning for Retrosynthetic Route Planning"
	14:45 16:15	<招待講演>『情報解析の自動化と創薬への応用』 座長：本間 光貴 (理化学研究所) I-06 白井 宏樹 (アステラス製薬(株)) 「抗体構造予測における機械学習」 I-07 伊藤 真里 (医薬基盤・健康・栄養研究所) 「AIを用いる創薬研究テーマ探索：臨床情報収集と知識処理の自動化への挑戦」 I-08 尾崎 遼 (筑波大学) 「NGSデータ解析のワークフロー記述と研究自動化への展望」	<スポンサードセッション> SS-02 富士通株式会社 『デジタルラボラトリプラットフォーム構想における研究自動化』 萩原 稔 (富士通(株)) 「デジタルラボラトリコンセプトの紹介」 植木 隆太 (株)デンソーウェーブ) 「人協働ロボット「COBOTTA」の特長と事例紹介」 久保木 俊彦 (富士通(株)) 「研究業務への協働ロボット実装検討」 原田 明彦 (富士通(株)) 「創薬研究Virtual Reality 技術および電子ペーパーの紹介」 「フリートークセッション」
	16:30 18:00	<スポンサードセッション> SS-03 国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所(NIBIOHN)／ライフインテリジェンス コンソーシアム (LINC) 『ライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)における創薬医療 AI の開発－創薬テーマ創出から臨床への橋渡しと知識ベース－』 水口 賢司 (医薬基盤・健康・栄養研究所) 「イントロダクション」 井ノ上 寛人 (東京電機大学)、長谷川 均 (ジー・サーチ) 「有望提携先や研究テーマの自動探索」 高橋 俊哉 (大正製薬) 「患者ブログからアンメット・メディカルニーズを抽出・提案するAI」 池口 茉莉恵 (第一三共) 「Drug Sensitivity-Based Cell Line Selection」 谷村 直樹 (みずほ情報総研) 「Understanding subtype specific mechanisms of TCGA gastric cancer using Bayesian network estimation」 長尾 知生子 (医薬基盤・健康・栄養研究所) 「創薬AI研究のための知識ベース構築に向けて」	

10月28日(水)【2日目】

日付	時間	チャンネル3 (CH3)	チャンネル4 (CH4)	(CH5)
10月28日(水)	10:00 12:00			
	12:00- 13:00			
	13:00 14:30	<企業セッション> ES-08 株式会社富士通九州システムズ 『AI・データ駆動型研究開発に対応したソリューションのご紹介』 松下 まゆみ (㈱富士通九州システムズ) 「AI・データ駆動型研究開発に対応したソリューション紹介」 古賀 裕美 (㈱富士通九州システムズ) 「AI創薬基盤（仮称）のご紹介」 石川 慧 (㈱富士通九州システムズ) 「SCIGRESSを活用したマテリアルズ・インフォマティクスへの取り組み」	<企業セッション> ES-09 ダッソー・システムズ株式会社 『BIOVIA の最新科学 - Discovery Studio 2020 新機能のご紹介』 高岡 雄司 (ダッソー・システムズ㈱) 『BIOVIA Generative Therapeutics Designのご紹介』 石崎 貴志 (ダッソー・システムズ㈱)	
	14:45 16:15	<シンポジウム> SP-04 経済産業省研究開発事業 毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト (AI-SHIPS プロジェクト) モデレーター： 植沢 芳広 (明治薬科大学) 講師： 船津 公人 (東京大学)、吉成 浩一 (静岡県立大学)、北島 正人 (㈱富士通九州システムズ) 「AI-SHIPSプロジェクトにおける毒性発現機序を考慮したラット反復投与毒性予測システム」 山崎 浩史 (昭和薬科大学) 「AI-SHIPSにおける生理学的薬物動態 (PBPK) モデルを用いた一般化学物質の臓器内濃度予測手法開発の現状」 庄野 文章 (東京大学) 「計算科学的手法を用いる毒性予測手法開発の現状と課題」 小島 肇 (国立医薬品食品衛生研究所) 「OECDにおけるコンピューターモデルの行政的な受け入れ」	<フォーカストセッション> FS-03 動きを見つめる中性子-活性サイトの水素からドメイン相関・解離会合まで- モデレーター： 杉山 正明 (京都大学) 玉田 太郎 (量子科学技術研究開発機構) 講師： 中村 照也 (熊本大学) 「酵素の基質特異性に関わる水素原子の観察」 井上 倫太郎 (京都大学) 「コントラスト変調小角中性子散乱によるタンパク質複合体の解離会合現象の可視化」 河野 秀俊 (量子科学技術研究開発機構) 「中性子散乱データを活用した超分子のモデリング」	
	16:30 18:00	<シンポジウム> SP-05 『高機能細胞デバイスをを用いた生体模倣モデルの開発－薬物動態を指向した活用法を考える－』 モデレーター： 石田 誠一 (崇城大学/NIHS) 樋坂 章博 (千葉大学) 講師 木村 啓志 (東海大学) 「多臓器型Microphysiological systemを用いた薬剤相互作用の検討」 荒川 大 (金沢大学) 「腸肝連結型MPSを用いた薬物代謝と臓器間相互作用の解析」 樋坂 章博 (千葉大学) 「生体模倣システム(MPS)を用いた生理学的薬物速度論(PBPK)による生体予測の戦略」	<フォーカストセッション> FS-04 オミックスの原理研究会 モデレーター： 美宅 成樹 (名古屋大学名誉教授) 広川 貴次 (産総研創薬プロファイリング研究センター) 荻島 創一 (東北大学未来型医療創成センター/東北メディカル・メガバンク機構) 講師： 美宅 成樹 (名古屋大学名誉教授) 「設計図としての生物ゲノム配列の隠れた構造」 広川 貴次 (産総研創薬プロファイリング研究センター) 荻島 創一 (東北大学未来型医療創成センター/東北メディカル・メガバンク機構) 「ヒト集団のデータから見るオミックスの原理の理解に向けて」	

10月29日(木)【3日目】

日付	時間	チャンネル1 (CH1)	チャンネル2 (CH2)
10月29日(木)	10:00 11:30	<招待講演>『創薬研究の自動化に向けた未踏領域への挑戦』 座長：石原 司（産業技術総合研究所） I-09 布施 新一郎（名古屋大学） 「マイクロフロー合成と自動合成が導く創薬の革新」 I-10 小野 寛太（高エネルギー加速器研究機構） 「量子ビーム計測と解析の最適化と自動化」 I-11 海津 一成（理化学研究所） 「細胞モデリングを自動化する」 I-12 山田 悠介（高エネルギー加速器研究機構） 「KEK構造生物学研究センターにおける蛋白質X線結晶構造解析実験の自動化」	<シンポジウム> SP-06 理化学研究所 『分子動力学計算ソフトウェアGENESISの創薬に役立つ機能の紹介』 モデレーター： 李 秀栄（医薬基盤・健康・栄養研究所） 講師： 尾嶋 拓（理化学研究所） 「タンパク質－リガンド結合の自由エネルギー計算法の開発と応用」 森 貴治（理化学研究所） 「高速クライオ電顕フィッティング法の開発と応用」
	11:30- 11:45		
	11:45 13:15	<企業セッション> ES-11 インフォコム株式会社 『KNIME機械学習自動化パッケージのご紹介』 『データ分析プラットフォーム KNIME Analytics Platform KNIME Server』	<企業セッション> ES-12 キシダ化学株式会社 『MCE-18- a novel molecular descriptor to reveal current medicinal chemistry trends in Big Pharma』 Bogdan Zagribelny（ChemDiv.Inc.） Yan Ivanenkov（ChemDiv.Inc.）
	13:30 15:30	<ブレナリー 講演> 『デジタルヘルス：情報解析が拓く医薬は社会実装へ』 座長：小長谷 明彦（恵泉女学園大学客員教授） K-07 田中 博（東京医科歯科大学名誉教授/東北大学東北メディカル・メガバンク機構） 「デジタルヘルス：「情報による治療」の波及」 K-08 小林 博幸（塩野義製薬株） 「ヘルスケア業界の抱える課題と新たなフェーズへの挑戦」 K-09 清水 良（田辺三菱製薬株） 「田辺三菱製薬のデジタルメディシンの取り組み」	

10月29日(木)【3日目】

日付	時間	チャンネル3 (CH3)	チャンネル4 (CH4)	チャンネル5 (CH5)
10月29日(木)	10:00 11:30	<スポンサードセッション> SS-05 オープンアイ・ジャパン株式会社 『MD in ORION: A Parallel Universe』 Christopher Bayly (OpenEye Scientific Software Inc.)		<チュートリアル> TS-01 第22回FMO研究会「FMOデータベースの紹介と解析チュートリアル」 モデレーター： 福澤 薫 (星薬科大学)、 渡邊 千鶴 (理化学研究所)、 本間 光貴 (理化学研究所) 講師： 高谷 大輔 (理化学研究所) 「FMODB の開発および相互作用データ解析」 本間 光貴 (理化学研究所) 「COVID-19 特集の紹介」 川嶋 裕介 (星薬科大学) <チュートリアル> FMODB データを用いた COVID-19 関連タンパク質の相互作用解析 関 祐哉 (㈱テクノプロ テクノプロ R&D 社) <チュートリアル> FMODB データ対象とした相互作用クラスタリング解析
	11:30- 11:45			
	11:45 13:15	<企業セッション> ES-13 アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社 『創薬研究におけるクラウド活用の実例 - myPresto × AWS-』 宮本 大輔 (アマゾン ウェブ サービス ジャパン(株)) 「Amazon Web Services で始めるクラウド HPC」 福西 快文 (産業技術総合研究所) 「創薬支援ソフトウェアmyPrestoでの膜系対応などの機能の紹介と開発の背景と今後について」 真下 忠彰 (㈱情報数理バイオ) 「MolDesk および DataCheck サービス：myPresto システムの一例として」 中村 寛則 (㈱バイオモデリングリサーチ) 「AWSとmyPresto を用いたインシリコスクリーニング計算の実例」 若林 良徳 (バイヘックス有限責任事業組合) 「myPresto x AWS開発事例のご紹介」	<企業セッション> ES-14 株式会社ジー・サーチ 『医薬分野におけるAI/自然言語解析による論文調査の効率化』 北島 正人 (㈱富士通九州システムズ) 「JDream SRによるゲノム医療向けの文献検索の活用イメージ」 森田 一 (㈱富士通研究所) 「ゲノム医療の文献・データベース調査を効率化する人工知能技術」 井上 和仁 (㈱ジー・サーチ) 「膨大な医学論文データからAIがエビデンスを抽出—新サービスJDreamSRのご紹介」	
	13:30 15:30			

10月29日(木)【3日目】口頭発表

日付	時間	チャンネル1 (CH1)	チャンネル2 (CH2)	チャンネル3 (CH3)
10月29日(木)	15:45 17:15	<口頭発表1> 『臨床応用 (その他) / レギュラトリサイエンス』 座長：石田 誠一 (崇城大学) 01-01 Mashiro Okunaka (Meiji Pharmaceutical University/National Cancer Center Hospital East) "Evaluation of the expression profile of diarrhea induced by irinotecan using the Japanese Adverse Drug Event Report Database" 01-02 Kaoru Sato (Lab Neuropharmacol, Div Pharmacol, NIHS) "Development of in vitro Blood Brain Barrier model reproducing microglia-induced cytokine/chemokine dynamics" 01-03 Shinichiro Horiuchi (National Institute of Health Sciences) "Establishment of culture protocol for application of human iPS cell-derived hepatocytes to cholestasis toxicity test" 01-04 Yukie Kuroda (National Institute of Health Sciences) "Long term culture using hepatocytes from chimeric mice with humanized livers for toxicity tests"	<口頭発表2> 『創薬応用 (その他) 』 座長：本間 光貴 (理化学研究所) 02-01 Hiroshi Kawai (Socium Inc.) "Phenotypic Network Screening: A New High Throughput Screening Platform" 02-02 Daiki Erikawa (Tokyo Institute of Technology, School of Computing) "Development of Monte Carlo Tree Search Based small organic compound generation system" 02-03 Akihiro Masuda (Department of Biological Sciences, Graduate School of Science and Engineering, Chuo University) "Development of SSDB software for reproducing the ChEMBL database and its current status" 02-04 Tamio Mizukami (Nagahama Institute of Bio-Science and Technology) "Development of new AI-based cell visualization technology that can solve problems in drug discovery and regenerative medicine"	<口頭発表3> 『分子ロボティクス』 座長：佐藤 佑介 (東北大学) 03-01 Nathanael Aubert-Kato (Ochanomizu University) "Automated exploration of CRN generating DNA structures" 03-02 Shuntaro Sato (School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology) "Optimization of the multi-step DNA computing reaction using oxDNA MD simulation" 03-03 Ibuki Kawamata (Tohoku University, Ochanomizu University) "Analysis of wireframe DNA nanostructure based on coarse-grained molecular dynamics simulated on a web server with simple interface" 03-04 Taisei Mori (Tohoku University) "Simulation of Self-replication System with Virtual Spring Model"
	17:30 19:00	<口頭発表4> 『構造生命科学』 座長：上村 みどり (帝人ファーマ㈱) 01-05 Sandhya Tiwari (RIKEN Center for Computational Science) "Protocol for Assessing the Optimal Pixel Size to Improve the Accuracy of Single-Particle Cryo-Electron Microscopy Maps" 01-06 Yohta Fukuda (Graduate School of Pharmaceutical Science, Osaka University) "High-resolution neutron crystallography visualizes an OH-bound resting state of a copper-containing nitrite reductase" 01-07 Ken Morishima (Institute for Integrated Radiation and Nuclear Science, Kyoto University) "Innovative Small-Angle Scattering for Structural Analysis of Biomacromolecule in Solution"	<口頭発表5> 『創薬応用 (その他) 』 座長：関嶋 政和 (東京工業大学) 02-05 Taro Kakuzaki (Chugai Pharmaceuticals, Co., Ltd.) "Deep generative model for designing antibody from antibody library data" 02-06 Eri Wakai (Department of Integrative Pharmacology, Mie University Graduate School of Medicine) "Search for preventive drugs against Cisplatin-induced nephrotoxicity using public database and electronic medical records." 02-07 Takahiro Niimura (Department of Clinical Pharmacology and Therapeutics, Tokushima University Graduate School of Biomedical Sciences) "Search for preventive drugs for drug-induced neuropathy using medical information database"	<口頭発表6> 『分子ロボティクス/計算化学 (分子認識) 』 座長：川又 生吹 (東北大学)、福澤 薫 (星薬科大学)、広川 貴次 (産業技術総合研究所) 03-05 Nicolas Lobato-Dauzier (Institute of Industrial Science, The University of Tokyo) "Temperature-based inputs for molecular reservoir computers" 03-06 Leo Cazenille (Department of Information Sciences, Ochanomizu University, Tokyo, Japan) "Exploring Self-Assembling Behaviors in a Swarm of Bio-micro-robots using Surrogate-Assisted MAP-Elites" 03-07 Yuma Handa (School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, Hoshi University) "Prediction of Binding of Existing Drugs to SARS-CoV-2 Main Protease Using Molecular Dynamics and Fragment Molecular Orbital Calculations"

10月30日(金)【最終日】

日付	時間	チャンネル1 (CH1)	チャンネル2 (CH2)	チャンネル3 (CH3)
10月30日(金)	10:00 12:00	<プレナリー講演>『我が国における新型コロナウイルス感染症COVID-19に対する計算科学の取り組み』 座長：上村 みどり (帝人ファーマ㈱) K-10 岩見 真吾 (九州大学理学研究院生物科学部門) 「COVID-19の数理科学」 K-11 松岡 聡 (理化学研究所 計算科学研究センター(R-CCS)) 「富岳：アプリケーションファーストのエクサスケールスパコンと、そのCOVID-19に対する戦い」 K-12 小松 慶太 (内閣官房 健康・医療戦略室 主査 (併) 内閣府、経済産業省) 「医療ビッグデータの研究開発への利活用 ～次世代医療基盤法は何をもたらすか～」		
	12:00-12:15	次年度の紹介		
	12:15-13:00			
	13:00 14:30	<口頭発表7> 『新型コロナ等ウィルス対策/計算化学(分子認識)』 座長：片倉 晋一 (慶應義塾大学)、福澤 薫 (星薬科大学)、広川 貴次 (産業技術総合研究所) 01-08 Ryo Hatada (Department of Chemistry & Research Center for Smart Molecules, Faculty of Science, Rikkyo University) "Interaction analyses between SARS-CoV-2 main protease and inhibitor N3 by using fragment molecular orbital method and molecular dynamics simulation" 01-09 Kazuki Akisawa (Department of Chemistry & Research Center for Smart Molecules, Faculty of Science, Rikkyo University) "Interaction analyses on SARS-CoV-2 spike proteins by using fragment molecular orbital method" 01-10 Nazim Medzhidov (Elix, Inc.) "Predicting inhibitors for SARS-CoV-2 RNA- dependent RNA polymerase using machine learning" 01-11 Mohini Yadav (Department of Engineering, Chiba Institute of Technology) "Theoretical insights into the molecular mechanism of NA-I117V-Mediated Oseltamivir Resistance in H5N1 Avian Influenza Virus"	<口頭発表8> 『ADME・毒性/その他』 座長：水間 俊 (帝京平成大学)、小長谷 明彦 (恵泉女学園大学) 02-08 Yusuke Hoshino (Chiba University) "The prediction of food effect on drug oral absorption by machine learning" 02-09 Mizuki Nakamori (Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Nagoya City University) "Prediction of the inhibitory activity of rat drug-metabolizing enzyme by in silico method" 02-10 Daitaro Misawa (SyntheticGestalt) "Introduction to the Issues of Dataset Construction in Pharmacokinetic Models" 02-11 Tetsuo Kitamura (Nonclinical Research Center, LSI Medience Corporation) "Analysis of monkey pose estimation using deep learning."	<口頭発表9> 『バイオインフォマティクス』 座長：荻島 創一 (東北大学東北メディカル・メガバンク機構)、茂柳 薫 (富士通㈱) 03-08 Shigeyuki Magi (Toho University) "Systems biological approaches to understand the mechanisms of cancer drug resistance & cardiotoxicity" 03-09 Satoshi Nagaie (Department of Informatics for Genomic Medicine, Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University) "Development of phenotyping algorithm of type 2 diabetes mellitus: A retrospective claims database analysis" 03-10 Naoko Kasahara (Department of Informatics for Genomic Medicine, Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University) "Integrated Database "dbTMM" with family linkage for stratification of cohort participants toward drug development" 03-11 Tsuyoshi Esaki (Shiga University) "Estimation of relationships between chemical substructures and gene expression antibiotic-resistance of bacteria: Adapting canonical correlation analysis for small sample data by gathered features using consensus clustering"
	14:45 16:15	<口頭発表10> 『計算化学(分子計算)』 座長：石川 岳志 (鹿児島大学) 01-12 Kentaro Takai (Fujitsu Ltd.) "Advanced methods to predict properties of cyclic peptides: conformation analysis of peptides cyclized by non-amide bonds" 01-13 Kei Moritsugu (Yokohama City University) "Enhanced conformational sampling of cyclic peptide Cyclorasin by coupled Nosé-Hoover equation" 01-14 Yuji Mochizuki (Department of Chemistry & Research Center for Smart Molecules, Faculty of Science, Rikkyo University & Institute of Industrial Science, University of Tokyo) "Development status of ABINIT-MP program in 2020" 01-15 Koji Okuwaki (Faculty of Science, Rikkyo University) "Development of multiscale FMO-DPD simulations for molecular design"	<口頭発表11> 『データサイエンス/ 構造相関解析』 座長：植沢 芳広 (明治薬科大学)、湯田 浩太郎 (㈱インシリコデータ) 02-12 Haris Hasic (Department of Computer Science, School of Computing, Tokyo Institute of Technology) "Single-step Retrosynthesis Prediction based on the Identification of Potential Disconnection Sites" 02-13 Tomohiro Sato (Center for Biosystems Dynamics Research, RIKEN) "Deep neural network models to predict ion channel inhibitors with pre-learning of activity information of analogous proteins" 02-14 Ryota Jin (Laboratory of Clinical Pharmacology and Pharmacometrics, Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Chiba University) "Statistically estimating life-long progression of chronic disease from the information of short clinical trials" 02-15 Yasunari Matsuzaka (Department of Medical Molecular Informatics, Meiji Pharmaceutical University) "Prediction models of peroxisome proliferator-activated receptor-gamma through a deep learning-based QSAR analysis, DeepSnap"	<口頭発表12> 『バイオインフォマティクス』 座長：清水 祐吾 (慶應義塾大学) 03-12 Satoshi Mizuno (Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University) "Development of machine learning based prediction model for hypertensive disorders of pregnancy (HDP)" 03-13 Kota Fujisawa (Graduate school of Engineering and Science, University of the Ryukyus) "Selecting the genes related to COVID-19 with PCA-based unsupervised feature extraction"
	16:15 16:30	クロージング		

目 次

Contents

CBI 学会 会長挨拶	1
CBI 学会 2020 年大会 大会長挨拶	2
CBI 学会 2020 年大会 実行委員長挨拶	4
協賛団体	5
大会スポンサー	6
大会組織委員会	8
企業広告	13
企業ロゴ	15
来年度大会のお知らせ	17

分 冊

Separate volumes

- 10 月 27 日（火）要旨集
- 10 月 28 日（水）要旨集
- 10 月 29 日（木）要旨集
- 10 月 30 日（金）要旨集

CBI 学会 会長挨拶

－CBI 学会 2020 年大会の開催に向けて－

本年も 10 月 27 日（火）より CBI 学会 2020 大会が開催されます。本来であれば会場であるタワーホール船堀が大勢の参加者でごった返す活気あふれる大会となるはずでしたが、コロナウィルスの感染拡大という全く予想しない状況に直面してしまいました。既にご連絡させていただきました通り、このような状況を鑑み、CBI 学会 2020 大会はオンラインでの開催とさせていただきました。

CBI 学会 2020 大会の夏目徹大会長、石原司実行委員長のもと早くより大会に向けた準備を行ってまいりましたが、オンライン開催に変更したことで、一から計画の練り直しをせざるを得ず、CBI 学会の事務局にとっても初めての試みであったこともあり、多大な時間と労力を強いられることとなってしまいました。改めて、夏目徹大会長、石原司実行委員長を初め関係者の方々に感謝申し上げます。

CBI 学会 2020 大会は、夏目先生、石原先生のもと『科学実験の自動化が拓く AI 時代の創薬研究』というテーマで開催されます。近年、ロボティクスと AI の融合は、世界規模で様々な領域において爆発的に発展しつつあり、特に知識集約型産業が中心で人口減少の問題を抱える日本においては、喫緊の課題であることは間違いありません。創薬においても極めて魅力的な内容であり、既に多くの取り組みが始まっております。夏目先生、石原先生は、この領域を牽引されているリーダーであり、今回、本テーマのもとで開催される 2020 年大会は、誰もが待ち望んだ大会であろうと考えます。

CBI 学会では、以前より AI 創薬に注目しており、年次大会や研究講演会を通して様々な視点より取り上げてまいりました。CBI 学会が常に考えている、『ドライとウェットの接点』という視点から考えますと、ドライである AI 創薬に対して、まさにロボティクスがウェットを担う大きな柱であることを今回のテーマは提示しています。創薬を中心として、これからの産業がどう変わっていくか、大きな流れを感じ取っていただくには絶好の機会になるかと思います。

先の述べましたように今回は初のオンラインでの開催となります。日程もこれまでの大会より 1 日多い 4 日間の期間となります。例年の年次大会と同様に、平行して数多くの企画が開催されるプログラムとなっており、参加される皆様のご期待に応える充実した内容のものを提供できることを確信しております。

今回のテーマに関わる方だけでなく、テーマにご興味をお持ちの方々も、この大きな流れに触れ、創薬を中心とした産業の将来を、是非、大会の場を通して理解、議論をしていただきたいと考えています。4 日間という長丁場ではございますが、皆様にとって意義ある 4 日間となることを祈念して、ご挨拶とさせていただきます。

CBI 学会 会長

片倉 晋一

（慶應義塾大学）

CBI 学会 2020 年大会 大会長挨拶

「科学実験の自動化が拓く AI 時代の創薬研究」 開催にあたって

「自動化」、これを 2020 年大会のテーマとすると議論を始めたのは、すでに一年以上前であると記憶している。かの時に、パンデミック、コロナ禍、ロックダウン、そしてテレワークが現実の生活として社会に浸透し、自動化・リモート研究が希求の事項となるなど、誰が予想したであろうか。

手前味噌であるが、

ライスサイエンスの自動化がもたらす「ロボティック・クラウド・バイオリジー」なるものを標榜したのは、さらに数年遡る。2017 年にそこそこ耳目を集めるジャーナルに白書を掲載した¹⁾。当時、著者らは、「ちょっとぶっ飛んだこと書きしまった」的な高揚感と少しの達成感があったように思う。レビューからは賛否両論、あるいは、かなり批判的なコメントも投げつけられたが、数回のやり取りで受理され、意外に早く掲載された。今思えば、科学の自動化というビジョンは、既に世界の意識の中では、ぶっ飛んでも先進的でもなく、

「近未来の既定路線」だったのだ、

と今強く実感する。ここで私が描いたつもりの未来は「在宅研究」である。各研究室・研究機関はもはや研究インフラを持つ必要はなく、研究者はネットワーク越しにロボティック・クラウド・バイオリジー・センターにプロトコルを送れば、センターで稼働するロボットたちが実験プロトコルを実行し、その結果・データが、研究者に送り返されるだけで研究が成立するという世界である。

本大会は、会期を大きく変更し、オンライン会議という前例・経験値が少ない運営を強いられながらも、粘り強く開催に漕ぎ着けた関係各位に感謝したい。ある意味では、好機をとらえてのテーマ・開催時期であるのかもしれない。

大会長として、この会を通して共有したいのは、自動化の「本当の」価値である。人が行っている作業を単純に機械・ロボットに置き換えることには、それほど価値ではない。価値とは、作業を機械に遷すことにより、人間の暗黙知・経験を可視化・数値化し、高い再現性を確保した上で、その作業・プロトコルが最適化されることである。その最適化されたプロトコルが何度でも、どこでも、いつでもロボット上で再現されたとき、大きな価値が生み出される。そして、数値化・可視化されたデジタル情報が蓄積され、クラウド・ネットワークを介して共有されることにより、サイエンスのオープン化が実現し、研究開発のすべての局面の生産性が爆発的に向上する。更に、老若男女、経験者・未経験者、研究費を持つもの持たざるもの分け隔てなく、都会・地方どこにしようとも、リモート環境により、研究のフラット化が訪れる。その時、自動化の価値は最大化すると確信している。

AI・機械学習が、囲碁やロジスティックのような閉鎖空間（生じる全ての現象は正確に観測・計測可能であり、予想外の出来事が起きない空間）で大成功するは、万人が知るところである。翻って、ライフサイエンスは、外乱が多く、予測不可能な現象は常態であり、再現性の危機に常にさらされている。さらに AI に必要な大規模データを生み出すにはコストがかかり、GAFA のようにネットワーク環境を提供すれば、膨大なデータを濡れ手に粟よ

と取得することは不可能。特に日本では、人員確保・人材育成が常に足枷となり、ライフサイエンス・バイオのビッグデータの未来はない。

しかし、ロボットはスケールし、再現性の高い高品質なデータを量産可能である。

今風に表現するならば、自動化とは、ライフサイエンス・創薬科学に、AI・機械学習を実装するための、デジタル・トランスフォーメーション(DX)の器である。

1) Yachie N, Robotic Biology Consortium, Natsume T*. Robotic crowd biology with Maholo LabDroids. *Nature Biotechnology* 35: 310–312 (2017)

CBI 学会 2020 年大会 大会長

夏目 徹

(産業技術総合研究所)

CBI 学会 2020 年大会 実行委員長挨拶

「科学実験の自動化が拓く AI 時代の創薬研究」 開催にあたって

全世界が甚大なる災厄に見舞われた 2020 年、本大会の開催までに至ったことは、ひとえに実行委員会、プログラム委員会そして事務局の方々の多大なる御力添えのおかげと、実行委員長として厚く御礼申し上げます。

本大会で掲げた主題である『科学実験の自動化』は、今、二つの意義を持つと言えます。

一つは、日々の生活を含めた社会常識の変革すら余儀なくされる中、wet な実験を伴う研究の場では、実験室に日々通い、実験を行い、データを収集する、という従前のスタイルが主流であることに向けた提起として。危難は人々の移動を抑制し、活動の停滞をもたらしました。人々を疾病から解放することを志す創薬研究も例外ではなく、切歯扼腕の思いを抱かれた方も少なくないでしょう。実験の自動化は、遠隔からの wet な実験とデータ収集を可能とするものであり、将来における wet な実験室のスタイルとなる可能性があります。

そして、もう一つは、様々な分野で社会実装が急速に進む人工知能（Artificial Intelligence: AI）活用の更なる高度化に向けた提起として。深層学習を含む機械学習の性能を十二分に引き出すには、大量かつ高質なデータが望まれる場面が少なくありません。人的対応には限界がある現実を勘案すれば、ルーチンのベンチワークの自動化による大量データの取得、あるいは、実験者の手技を凌駕する高質データの取得を可能とする実験ロボットと AI の協調は、実験科学の未来像の一つとして想像に難くありません。更に、本来は超高次元で記述されるフィジカル（実）空間に潜在する関係性を能動的・自律的に探索することも可能となり、時に試行錯誤を伴いつつ進められてきた研究活動に加速をもたらさうでしょう。分野複合的な創薬研究においては、Chemistry, Biology, Informatics 各々単独に留まらず、横断かつ連続的なものとして、より高次元で融合した姿となることも期待されます。Chem-Bio Informatics Society に集う多彩な研究者のネットワークが、創薬研究の未来像を導く可能性を秘めていると考えております。

CBI 学会 2020 年大会はマルチチャネルでのオンライン開催とし、ライフサイエンスの研究で実験ロボットや AI を活用した自動化を進められている先生方に加え、材料科学や情報科学などの様々な分野において第一線で活躍される先生方をお招きし、ご講演をいただきます。異領域の最新動向を学び、来るべき未来の創薬研究の姿を議論できる場となることを願っています。

CBI 学会 2020 年大会 実行委員長

石原 司

（産業技術総合研究所）

協賛団体
Academic Association

< 協賛 >

日本薬理学会

日本生理学会

日本応用数理学会

日本分子生物学会

日本生物物理学会

情報処理学会

日本バイオインフォマティクス学会

<Cooperated by>

The Japanese Pharmacological Society (JPS)

The Physiological Society of Japan (PSJ)

The Japan Society for Industrial and
Applied Mathematics (JSIAM)

The Molecular Biology Society of Japan (MBSJ)

The Biophysical Society of Japan

Information Processing Society of Japan (IPS)

Japanese Society for Bioinformatics (JSBi)

大会スポンサー Sponsors

<スポンサードセッション>

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社	Amazon Web Services Japan K.K.
オープンアイ・ジャパン株式会社	OpenEye Japan Co., Ltd.
富士通株式会社	Fujitsu Limited
国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所 (NIBIOHN)	National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition
／ライフ インテリジェンス コンソーシアム (LINC)	/ Life Intelligence Consortium

< Sponsored Session >

<シンポジウム>

AMED/BINDS インシリコユニットにおける 創薬支援研究	Research activities for supporting drug discovery by <i>in-silico</i> unit of BINDS (AMED)
国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構 (JAXA)	Japan Aerospace Exploration Agency
経済産業省研究開発事業 毒性関連ビッグデータ を用いた人工知能による次世代型安全性予測手 法開発プロジェクト (AI-SHIPS プロジェクト)	AI-Based Substance Hazard Integrated Prediction System (AI-SHIPS) Project (The Ministry of Economy, Trade and Industry, Research and Development)
高機能細胞デバイスを用いた生体模倣モデルの 開発－薬物動態を指向した活用法を考える－	Development of <i>in vitro</i> human body/tissue- mimicking model using high functional cell devices - Consideration for pharmacokinetic-oriented applications -
国立研究開発法人 日本医療研究開発機構 (AMED)	Japan Agency for Medical Research and Development
理化学研究所	RIKEN

< Symposium >

<企業セッション>

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社	Amazon Web Services Japan K.K.
インフォコム株式会社	INFOCOM CORPORATION
株式会社 Elix	Elix, Inc.
キシダ化学株式会社	KISHIDA CHEMICAL Co., Ltd.
株式会社ジー・サーチ	G-Search Limited
ダッソー・システムズ株式会社	Dassault Systemes K.K.
DKSH ジャパン株式会社	DKSH Japan K.K.
ドットマティクス株式会社	Dotmatics Ltd.
パトコア株式会社	Patcore, Inc.

< Enterprise Session >

株式会社富士通九州システムズ
ブルカージャパン株式会社
株式会社モルシス
株式会社ワールドフュージョン

FUJITSU KYUSHU SYSTEMS LIMITED
Bruker Japan K.K.
MOLSIS Inc.
World Fusion Co., LTD.

<広告掲載>

三井情報株式会社
株式会社シーエーシー

<Advertisement>

mitsui knowledge industry co., ltd.
CAC Corporation

<ロゴスポンサー>

シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社

<Logo Sponsor>

Sigma-Aldrich Japan G.K.

大会組織委員会 CBI2020 Committee Members

<CBI 学会 2020 年大会大会長>

夏目 徹 (産業技術総合研究所)

<大会実行委員会>

実行委員長： 石原 司 (産業技術総合研究所)
池田 和由 (理化学研究所／慶應義塾大学)
石田 誠一 (崇城大学)
上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)
片倉 晋一 (慶應義塾大学)
小長谷 明彦 (恵泉女学園大学／
合同会社分子ロボット総合研究所)
広川 貴次 (産業技術総合研究所)
福澤 薫 (星薬科大学)
本間 光貴 (理化学研究所)
茂櫛 薫 (富士通株式会社)

<大会企画委員会>

光山 統泰 (産業技術総合研究所 人工知能研究センター)
高橋 恒一 (理化学研究所 生命機能科学研究センター)
山田 悠介 (大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器機構)

<プログラム委員会>

委員長： 中嶋 久士 (株式会社エクサウィザーズ)
副委員長： 嶋田 朋嘉 (第一三共株式会社)
池田 和由 (理化学研究所／慶應義塾大学)
石川 岳志 (鹿児島大学)
石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)
石田 誠一 (崇城大学)
石原 司 (産業技術総合研究所)
植沢 芳広 (明治薬科大学)
江崎 剛史 (滋賀大学)
岡田 晃季 (日本たばこ産業株式会社)
萩島 創一 (東北大学 東北メディカル・メガバンク機構)
片倉 晋一 (慶應義塾大学)
加藤 幸一郎 (九州大学)
上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)
河合 隆利 (慶應義塾大学)
川又 生吹 (東北大学)

<Conference Chairperson>

Toru Natsume AIST

<Organizing Committee>

Chairperson:	Tsukasa Ishihara	AIST
	Kazuyoshi Ikeda	RIKEN/Keio University
	Seiichi Ishida	Sojo University
	Midori Kamimura	Teijin Pharma Limited
	Shinichi Katakura	Keio University
	Akihiko Konagaya	Keisen University/ Molecular Robotics Research Institute, Ltd.
	Takatsugu Hirokawa	AIST
	Kaori Fukuzawa	Hoshi University
	Teruki Honma	RIKEN
	Kaoru Mogushi	Fujitsu Limited

<Planning Committee>

	Toutai Mitsuyama	AIST
	Koichi Takahashi	RIKEN
	Yusuke Yamada	High Energy Accelerator Research Organization, KEK

<Program Committee>

Chairperson:	Hisashi Nakashima	ExaWizards Inc.
Vice-Chairperson:	Tomohiro Shimada	DAIICHI SANKYO COMPANY, LIMITED
	Kazuyoshi Ikeda	RIKEN/Keio University
	Takeshi Ishikawa	Kagoshima University
	Toshihisa Ishikawa	NGO Personalized Medicine & Healthcare
	Seiichi Ishida	Sojo University
	Tsukasa Ishihara	AIST
	Yoshihiro Uesawa	Meiji Pharmaceutical University
	Tsuyoshi Esaki	Shiga University
	Akitoshi Okada	Japan Tobacco Inc.
	Soichi Ogishima	Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University
	Shinichi Katakura	Keio University
	Koichiro Kato	Kyushu University
	Midori Kamimura	Teijin Pharma Limited
	Takatoshi Kawai	Keio University
	Ibuki Kawamata	Tohoku University

熊澤 啓子	(帝人ファーマ株式会社)
小長谷 明彦	(恵泉女学園大学／ 合同会社分子ロボット総合研究所)
小宮 健	(東京工業大学)
佐藤 佑介	(東北大学)
佐藤 朋広	(理化学研究所)
清水 祐吾	(慶應義塾大学)
関嶋 政和	(東京工業大学)
高岡 雄司	(ダッソー・システムズ株式会社)
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)
多田 幸雄	(CBI 学会)
多田隈 尚史	(上海科技大学／東京大学)
田中 成典	(神戸大学)
永堀 博久	(住友化学株式会社)
中村 光浩	(岐阜薬科大学)
夏目 やよい	(国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)
広川 貴次	(産業技術総合研究所)
福澤 薫	(星薬科大学)
藤田 直也	(大鵬薬品工業株式会社)
本間 光貴	(理化学研究所)
増田 友秀	(東レ株式会社)
水口 賢司	(国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)
水間 俊	(帝京平成大学)
美宅 成樹	(名古屋大学名誉教授)
茂櫛 薫	(富士通株式会社)
山岸 賢司	(日本大学)
山本 一樹	(株式会社シャルクス／ 東京大学アイソトープ総合センター)
湯田 浩太郎	(株式会社インシリコデータ)
渡邊 博文	(株式会社ウィズメーティス)
渡邊 怜子	(国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)

Keiko Kumazawa	Teijin Pharma Limited
Akihiko Konagaya	Keisen University/ Molecular Robotics Research Institute, Ltd.
Ken Komiya	Tokyo Institute of Technology
Yusuke Sato	Tohoku University
Tomohiro Sato	RIKEN
Yugo Shimizu	Keio University
Masakazu Sekijima	Tokyo Institute of Technology
Yuji Takaoka	Dassault Systemes K.K.
Kazutoshi Takahashi	Ajinomoto Co., Inc.
Seisuke Takimoto	Japan Tobacco Inc.
Yukio Tada	The Chem-Bio Informatics Society
Hisashi Tadakuma	ShanghaiTech University/The University of Tokyo
Shigenori Tanaka	Kobe University
Hirohisa Nagahori	SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED
Mitsuhiro Nakamura	Gifu Pharmaceutical University
Yayoi Natsume	National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition
Takatsugu Hirokawa	AIST
Kaori Fukuzawa	Hoshi University
Naoya Fujita	TAIHO PHARMACEUTICAL CO., LTD.
Teruki Honma	RIKEN
Tomohide Masuda	TORAY INDUSTRIES INC
Kenji Mizuguchi	National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition
Takashi Mizuma	Teikyo Heisei University
Shigeki Mitaku	Emeritus Professor, Nagoya University
Kaoru Mogushi	Fujitsu Limited
Kenji Yamagishi	Nihon University
Kazuki Yamamoto	SHaLX Inc./ Isotope Science Center, The University of Tokyo
Kotaro Yuta	In Silico Data, Ltd.
Hirofumi Watanabe	WithMetis Co., Ltd.
Reiko Watanabe	National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

企業広告

三井情報株式会社

株式会社シーエーシー

バイオインフォマティクスに最適な計算環境をご提案します。

◆MKI-DryLab :: Platform

お客様の課題やニーズに沿ったセキュアでプライベートな解析環境をクラウド上(Microsoft Azure)に構築し、スパコン並みの計算力で、「迅速・低コスト・高性能」な計算創薬・バイオインフォマティクス解析環境を叶えます。

A) Startup

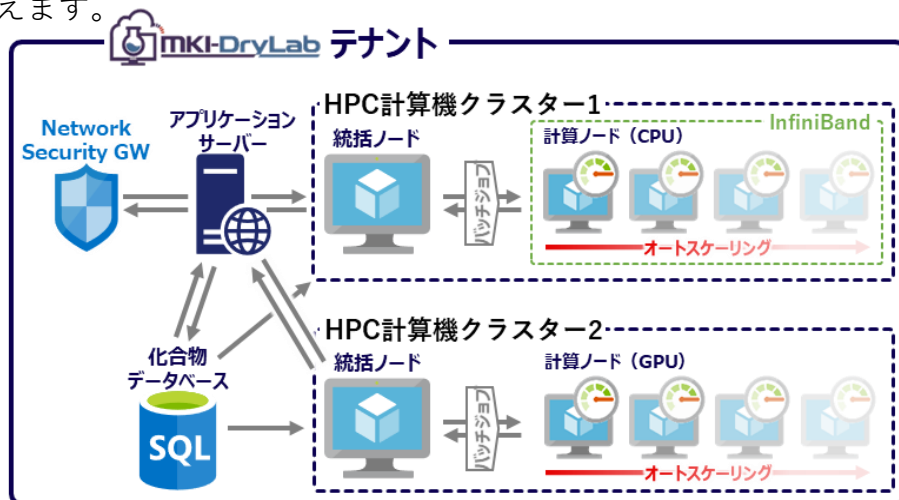
計算創薬環境、およびバイオインフォマティクス解析環境をMicrosoft Azure上に構築します。

B) Migration to Cloud

既存のオンプレミス環境で構築されているお客様の解析環境をクラウド上へ移行します。また、HPC計算機クラスターのオートスケーリングによる最適な規模の計算環境を実現します。

◆MKI-DryLab :: Consulting

半世紀にわたって培ったバイオサイエンスのknowledgeをもとに、お客様の課題やご要望をスペシャリストによるコンサルティングで解決・支援します。



核酸解析プラットフォーム

2020/6リリース!!

AQXeNA

Analyze and Quantify Xeno Nucleic Acids

核酸医薬品の薬物動態評価や品質管理評価における核酸代謝物の同定・分析の解析作業を自動化。製薬・研究開発に従事する皆様の業務効率化を実現します。

核酸構造の
定義

ターゲット
核酸配列の登録

計測データから
ターゲット核酸の同定

ターゲット核酸配列
同定後の分析

核酸構造ライブラリと
新規核酸ライブラリの
追加

天然/人工核酸の
配列を自由に登録

代謝物ピークの
同定・定量分析を
自動実行

Treat/control比較や
デコンボリューション等
の詳細分析

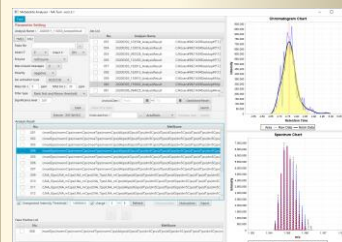
対応機器メーカー・データフォーマット

- Thermo Fisher Scientific (.RAW)
- Waters (.RAW)
- Sciex (.WIFF)
- Agilent (.D)
- Bruker (.D)
- Shimadzu (.LCD)
- MzML (.mzML)



※機器・メーカー・データフォーマットの
最新の対応状況につきましては、お問い合わせください。

世界初の
核酸同定アルゴリズム
「Ariadne」
による正確な
フラグメントイオン同定



MKI

MITSUI
KNOWLEDGE
INDUSTRY

三井情報株式会社

<https://www.mki.co.jp/solution/bio.html>

E-mail : sales-dg@mki.co.jp

Dotmaticsの豊富なソリューションを
導入から運用までワンストップでご提供します

CACのDotmatics 導入支援サービス

ライセンス提供

Dotmatics製品の
日本代理店として
ライセンス販売は
CACにお任せください

導入支援

複数社への導入実績あり
スムーズな導入プロセス
を遂行いたします

サポート

運用開始後の
様々なご要望に対応し
安定稼働をご支援します

コンサルティング

創薬に関わる業務知識を
ベースにDotmatics社と
連携し、コンサルティング
支援を行います

豊富な創薬系システム構築経験、創薬関連製品をもとに

貴社の創薬業務をサポートいたします

主な創薬関連製品

動物管理システム
PLACT

動物実験の審査および飼育業務に特化したシステムです

- ・ 動物実験申請手続きの円滑化、迅速化をサポート
- ・ 飼育管理業務に関する情報を一元管理
- ・ 獣医学的ケアにおける情報共有を促進

化合物
サンプル管理
ソリューション

化合物の在庫管理から試験依頼業務を統合的に支援するソリューションです

- ・ 外部委託も含めた在庫の一元的な管理
- ・ 原末、溶液含めた統合的な入出庫フロー
- ・ 在庫管理とも連動した試験依頼機能

お問い合わせ

CAC 株式会社 **シーエーシー**

創薬関連製品担当

〒103-0015 東京都中央区日本橋箱崎町24-1

TEL **03-6667-8046**

E-mail **pharma@cac.co.jp**

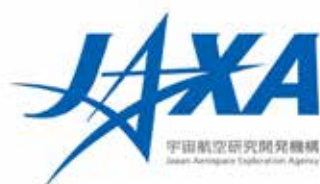
URL **<https://www.cac.co.jp/>**



株式会社 富士通九州システムズ



FIIX



国立研究開発法人
日本医療研究開発機構



来年度大会のお知らせ

CBI 学会 2021 年大会

「デジタルトランスフォーメーションで目指すライフサイエンス革命 ～AI 駆動型の創薬戦略～」

開催のご案内

会期：2021 年 10 月 26 日(火)－28 日(木)

オンライン開催

開催趣旨：

人工知能（Artificial Intelligence: AI）は、学術研究の域を超え、社会生活に浸透してきております。AI 技術を活用したデジタルトランスフォーメーションにより、Society5.0 など新しい産業構造への変革も期待されておりますが、新型コロナ感染症対策を通じて様々な問題を露呈したのもまた事実です。

創薬の研究開発に目を向けると、国内の製薬企業にて世界はじめて AI を活用して創製した化合物の臨床試験が開始されるなど目覚ましい進展があり、「ライフ インテリジェンス コンソーシアム (LINC)」では、医薬品開発プロセスのさまざまな課題や医療・ヘルスケアにおける現場ニーズに応える AI 技術が開発されております。また、スーパーコンピュータ「富岳」の運用も始まり、新型コロナ治療薬候補の探索等含め、数多くの研究成果が報告されるなど、着実な技術の底上げとともに成果が蓄積されてきております。一方、欧州でも製薬企業を中心に Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery (MELLODDY) project が開始されるなど国際競争も熾烈な状況となりつつあります。

本学会では、2016 年以降「AI 創薬」をテーマにした数多くの研究講演会を開催し、また年大会のテーマにも AI を主題に掲げ、構造生物学、情報科学、創薬化学などさまざまな視点から議論を重ねて参りました。

2021 年の大会では、情報科学、計算化学、創薬化学、生物学、医療などの分野で活躍されている研究者、専門家の先生をお招きし、ウィズ/ポストコロナの現状も踏まえて、データ共有、AI 開発、創薬現場における AI 活用などについて議論を深めます。最新状況や今後のニーズを共有し、ポストコロナ時代の創薬研究を創造する機会になれば幸いです。

製薬企業、IT 企業、アカデミアで AI×＜創薬・育薬・ライフサイエンス＞を推進している方々、あるいは興味をお持ちの方の積極的な参加をお待ちしております。

CBI 学会 2021 年大会

大会長	奥野 恭史（京都大学大学院医学研究科）
実行委員長	中嶋 久士（株式会社エクサウィザーズ）
副実行委員長	嶋田 朋嘉（第一三共株式会社）

CBI 学会 2020 年大会
2020 年 10 月 26 日発行

編集責任：夏目 徹 石原 司
制作責任：小長谷 明彦
制作：小澤 陽子 小宮山 直美 塩塚 真理
岸 早絵 藤田 真澄

発行：CBI 学会 2020 年大会
事務局：

〒108-0023
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

Chem-Bio Informatics Society Annual Meeting 2020
October 26, 2020

Editor in chief： Toru Natsume, Tsukasa Ishihara
Production Director： Akihiko Konagaya
Production Staff：

Yoko Ozawa, Naomi Komiyama, Mari Shiozuka,
Sae Kishi, Masumi Fujita

Published by：
Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2020