

10月28日(水)

チャンネル 1 (CH1)	1
チャンネル 2 (CH2)	13
チャンネル 3 (CH3)	18
チャンネル 4 (CH4)	25

CBI 学会 2020 年大会

Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2020



10月28日（水）

CH1 チャンネル 1

<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）3
「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）4
「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）5
「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」

<企業セッション>

- ES-06** 株式会社モルシス6
『創薬モダリティの多様性に対応した製品のご紹介』

<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（アステラス製薬株式会社）8
「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）9
「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）10
「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-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)..... 11
『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-』

スマートラボへの実現に向けた AI、ロボット技術 AI and Robotics to achieve Smart LAB

谷川 民生
Tamio Tanikawa

(国研)産業技術総合研究所 情報・人間工学領域
インダストリアル CPS 研究センター
AIST

我が国の大きな課題として少子高齢化における労働生産人口低下の課題が深刻化している。特に、その影響が大きいのが労働集約型の産業であり、生産分野、物流分野等、自動化が進まずに人の作業に大きく依存している産業分野は、労働力が確保できず、生産力の低下は避けられない。

今まで、工業製品分野において自動化技術は大きく発展してきた。従来の大量生産の時代では、生産ラインのロボット導入等で自動化への動きは主流であった。特にロボットは同じ動作を正確に実現できることから、同じ製品を大量に生産する自動車や家電分野には、自動化のニーズは高く、産業ロボット業界は大きくマーケットを広げることが可能であった。しかし、近年、大量生産から、多品種少量生産、さらには、変種変量生産とマーケットのニーズが変化すると、生産する品種が多様になり、製品のライフサイクルが短いことで、自動化に係る設備投資コストに見合うだけのマーケットが縮小し、多様な作業をこなすことができる人を大量に雇用するほうが、マーケットの需要変動にも対応でき、労働集約型産業に移っている。

創薬の分野も、プロトコルが決まっていれば、専用の自動化機械を開発すれば済む話ではあるが、プロトコル自体も固まっていない場合は、様々な作業を試す必要があり、多くの人手作業に頼るほうが効率的である。

しかし、今後の生産年齢人口低下を鑑みると、人材不足という課題は、より深刻になることは予想され、多様な動きに対しても容易に自動化が可能なシステムの技術開発が必要とされる。

本講演では、産総研において研究開発している、ロボット等の自動化技術において、AI 技術を活用することで、容易に自動化を可能とする技術を紹介する。また、今後の労働集約型産業に対する人手不足の課題解決に向けた、人と機械が協調する仕組みを実現するための活動を合わせて紹介する。

LINC 3 年間のチャレンジと post LINC に向けた課題
LINC 3-year challenges and issues to be solved for post LINC

本間 光貴
Teruki Honma

理化学研究所 生命機能科学研究センター 制御分子設計研究チーム
RIKEN

2015 年ごろから、ビッグデータと GPU を利用した深層学習が一部の分野で人間の能力を超える局面が見られ、2016 年に Alpha Go が囲碁のトッププロを破った象徴的な出来事も相まって、多くの分野における AI の応用が始まった。日本においては、京都大学の奥野らのイニシアティブのもと、2016 年 11 月にいち早くライフインテリジェンスコンソーシアム (LINC) がスタートし、2017 年 6 月から 3 年間の期間を区切って予防・先制医療、ターゲット探索から臨床試験、市販後調査まで、創薬・医療の幅広い過程を対象とする AI 開発を開始した。

LINC では、過程ごとに分けた 10 個のワーキンググループに合計 30 個のプロジェクトを置き、製薬企業等のライフ系企業、IT 企業、アカデミアが連携して AI 開発を進めている。特筆すべき点は、各参加者が手弁当で取り組んでいる点であり、アカデミアは、基盤技術、施設の提供や事務局機能を担っている。これまでに 30 以上の学会発表、論文発表等を行い、一部のプロジェクトでは、開発した製品の特許化（溶解度予測）や製品化（研究者のマッチング）まで到達しており、成果が出つつある。

一方、LINC の課題も見えてきている。一つは、手弁当ということもあり、企業の開発力が大きく割けないという点であり、また、医療データなど、アクセスしにくいデータが必須の AI については、最初に着手すべきデータ収集に時間がかかる。単発の AI については、論文公知の状況（あるいはそれ以上）までキャッチアップすることが可能だが、そこから一歩踏み込んで、現場での実用性の高い、高度に統合された AI システムの開発は、次の課題になる。

本講演では、これまでの LINC の成果と、post LINC に向けた課題を概観する。また、課題の解決法として、様々な局面におけるソリューションを提供できる高度な AI システムを持つ IT 企業の育成に向けた方向性と、最近開始された筆者が代表研究者を務める次世代創薬 AI 事業の概要についても紹介する。

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

Materials Informatics: machine learning for automated materials design and synthesis

吉田 亮

Ryo Yoshida

統計数理研究所(物質・材料研究機構)

The Institute of Statistical Mathematics

National Institute for Materials Science

本講演では、物質・材料研究を駆動するデータ科学の基盤技術とマテリアルズインフォマティクス (MI) の現状と展望を解説する。高分子熱物性の研究[1]や走査型電子顕微鏡を用いた材料組織のプロセス制御[2]等への事例に基づき、これらの研究を駆動するデータ科学の解析技術 (ベイズ推論による機能性分子の自動設計[3,4]、合成経路の予測[5]、実験計画法に基づく分子シミュレーションと機械学習の融合、転移学習[6-8]、深層生成モデルによる材料組織の予測[2]等) を解説する。また、高分子物性の先端計測や第一原理計算及び分子動力学シミュレーションの自動計算システムを用いた高分子物性データベースや高分子自動設計システムの現状を紹介する。

- [1] Wu *et al.* Machine-learning-assisted discovery of polymers with high thermal conductivity using a molecular design algorithm. *npj Comput Mater.* 5:66 (2019) doi:10.1038/s41524-019-0203-2
- [2] Banko *et al.* Predicting structure zone diagrams for thin film synthesis by generative machine learning. *Commun Mater* 1, 15 (2020). <https://doi.org/10.1038/s43246-020-0017-2>
- [3] Ikebata *et al.* Bayesian molecular design with a chemical language model. *J Comput Aided Mol Des.* 31(4):379--391 (2017) <https://doi.org/10.1007/s10822-016-0008-z>
- [4] Wu *et al.* iQSPR in XenonPy: a Bayesian inverse molecular design algorithm. *Mol Inform.* 39:1900107 (2019) doi:10.1002/minf.201900107
- [5] Guo *et al.* A Bayesian algorithm for retrosynthesis. *ArXiv* (2020) arXiv:2003.03190
- [6] Yamada *et al.* Predicting materials properties with little data using shotgun transfer learning. *ACS Cent Sci.* 5(10):1717-1730 (2019). doi:10.1021/acscentsci.9b00804
- [7] Ju *et al.* Exploring ultrahigh lattice thermal conductivity crystals via feature-based transfer learning. *ChemRxiv* (2019) doi:10.26434/chemrxiv.9850301.v1
- [8] Minami *et al.* A general class of transfer learning regression without implementation cost. *ArXiv* (2020) arXiv:2006.13228

創薬モダリティの多様性に対応した製品のご紹介

＜企業セッション＞ ES-06 10月28日（水）13:00–14:30

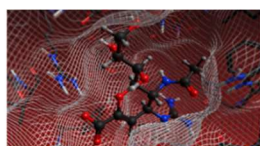
創薬モダリティの多様化に伴い、創薬研究支援ソフトウェアにはモダリティに対応した機能が求められています。弊社取り扱い製品の中から、「統合計算化学システム MOE」、「研究情報管理統合プラットフォーム Scilligence」、「医薬品安全性情報ポータル OFF-X」の3製品について創薬モダリティ関連の機能をご紹介します。

「統合計算化学システム MOE」

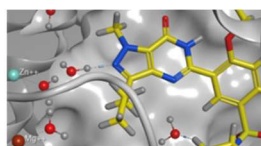
池上貴史（株式会社モルシス）

MOE は低分子、ペプチド、タンパク質、抗体、核酸のデザインとシミュレーションに対応した創薬モダリティ研究を支援する統合計算化学プラットフォームです。MOE には、Structure/Fragment/Ligand-Based Drug Design、QSAR/QSPR 解析、ファーマコフォア解析、バーチャルスクリーニング、タンパク質モデリング、タンパク質デザイン、分子シミュレーションを目的とする最新の計算化学アプリケーションが搭載されています。計算化学者、メディシナルケミスト、バイオリジスト、X線結晶構造解析者は、共通の分子モデリング環境である MOE を用いて創薬研究の加速化・効率化を図れます。本セッションでは、化学構造と活性値を用いた SAR/MMP 解析、ペプチドと受容体の相互作用解析、抗体の分子設計と Developability の評価、核酸モデリングを中心に MOE を用いた応用事例を紹介します。

MOE ー全ての研究者に柔軟な分子モデリング環境を提供ー



立体構造の可視化



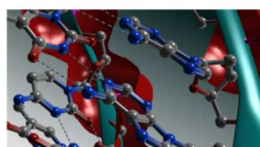
Structure-Based Design



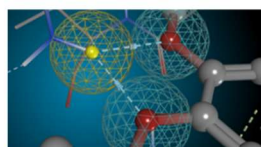
MOEsaic – SAR, MMP



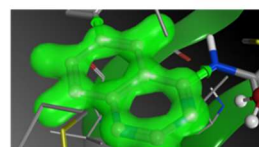
Ligand-Based Design



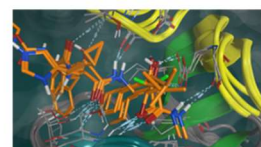
核酸モデリング



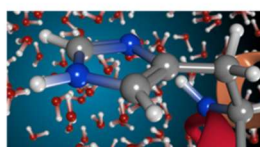
バーチャルスクリーニング



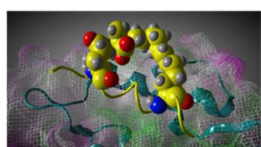
Fragment-Based Design



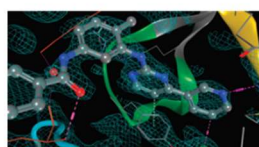
構造生物学



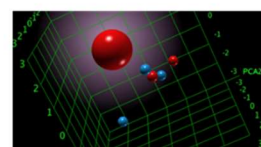
分子シミュレーション



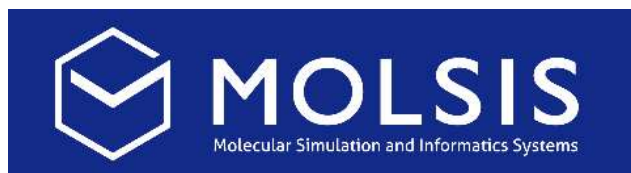
ペプチド・抗体デザイン



X線結晶構造解析



ケモインフォマティクス/QSAR



株式会社モルシス ライフサイエンス部

TEL: 03-3553-8030 E-mail: sales@molsis.co.jp

<https://www.molsis.co.jp/>

「研究情報管理統合プラットフォーム Scilligence」 篠崎康裕（株式会社モルシス）

Scilligence 製品は多様な創薬モダリティの研究データに対応した研究情報管理統合プラットフォームです。生体高分子を表現する HELM や、HELM と構造式を統合的に扱う分子描画ツール JSDrawなどを基盤として、低分子化合物からペプチド／タンパク質・核酸・糖鎖・抗体といった生体高分子や ADC（抗体-薬物複合体）、組織切片や細胞株まで、幅広い創薬モダリティをシームレスに扱うことができます。登録されたデータは構造式、配列、HELM 表記、キーワードなどで検索できるので、必要な研究データを簡単に参照できます。これにより、チーム内での情報共有が進み、研究業務の効率化に繋がります。Scilligence 製品は、電子実験ノート ELN、物質登録・アッセイデータ管理 RegMol、在庫管理 Inventory、機器出力データ収集・管理 SDMS、プロジェクト・ワークフロー管理 PMF で構成されています。



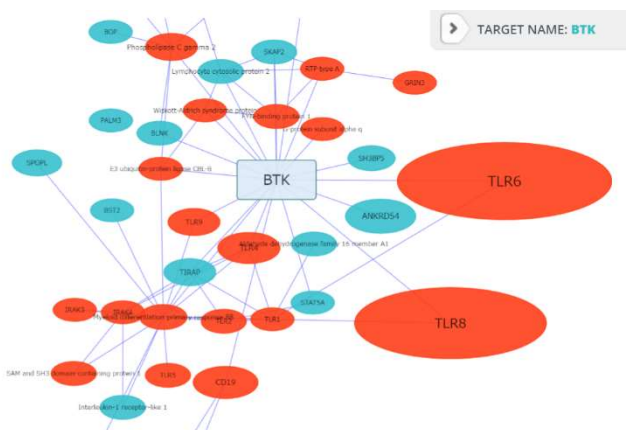
「医薬品の安全性情報ポータル OFF-X」

東田欣也（株式会社モルシス）

創薬モダリティの多様化が進む中、医薬品開発において、その安全性を統一的に評価することは、非常に重要です。BioInfoGate 社の OFF-X は、規制機関、学術論文、学術会議、企業などの多くの情報源から収集された前臨床試験の毒性情報と臨床試験および市販後の安全性情報を統合し、更に高度な解析機能を組み合わせ、情報提供する、医薬品の安全性情報ポータルです。2020 年 7 月現在、専門家によりマニュアルキュレーションされた 796,363 の安全性アラート、14,923 のターゲット、18,219 の医薬品および生物製剤、8,969 の有害事象が登録されており、データベースは日々更新されています。

ターゲット、有害事象、ドラッグをクエリーとして、安全性情報を検索することができ、全ての情報に対して、ドラッグアラート／クラスアラートの区別、情報の信頼性の評価が行われています。

解析機能としては、タンパク質のインタラクトームをベースにした SAFETY MAP 解析により、タンパク質—タンパク質相互作用マップから、関連性の高いターゲットに対する医薬品の安全性情報を、モダリティを区別することなく、統一的に調べることができます。



抗体構造予測における機械学習 Machine learning for antibody structure prediction

白井 宏樹
Hiroki Shirai

アステラス製薬株式会社
Astellas Pharma Co., Ltd.

筆者の呼びかけでインシリコ抗体創薬に関する国際産学連携としての意見【1】をまとめたのは 2014 年のことであったが、その予想を超えて同分野の重要性が増している。

今や抗体医薬品が世界医薬品売上高トップ 10 の過半数を占めるに至っている。これは高い臨床効果と高い薬価によるが、よって継続的な上市が望まれるとともに、そのコスト低減は社会的要請となっている。FDA のタスクフォースは、上市后 1 年で販売中止となったある蛋白医薬品を分析し、重篤副作用が蛋白凝集（コロイド状態の不安定性）に起因する可能性を指摘した【2】。開発後期におけるプロジェクトの中止は多大な時間・cost の浪費であり、医薬品 true cost の大きな上昇圧である。このため、創薬段階でインシリコによる配列リスク評価を行い、これらを指標にしたクロンの選択・設計が行われるようになってきているのである【3】。また分子形状が通常型抗体から改変型抗体の医薬品へと複雑化する傾向にあり、インシリコによる効率的なリード最適化（蛋白質工学）も重要となっている。

アステラス製薬では津本浩平教授（東京大学）との長年の共同研究により、合理的設計手法の開発を行ってきた【4,5】。これらの設計能に、抗体分子や抗原分子の立体構造情報の精度が大きく依存する。そこで中村春木教授（大阪大学、現国立遺伝学研究所）、水口賢司教授（医薬基盤研究所、現大阪大学）らと共同で抗体可変領域のモデリングアセスメント会議（Antibody modeling Assessment II (AMA-II)）に参加し、最も精度の高い予測をすることができた【6】。これは様々な工夫が効いたわけであるが、その中の一つに、筆者が長年拘ってきた CDR-H3 領域の構造予測法【7】が挙げられる。CDR-H3 は抗体の著しい多様性を持つ原因である、V,D,J 遺伝子の再編成の位置に対応しており、配列・構造が最も多様な領域である。抗原認識に最も重要な領域でもある。この構造予測法は念入りの研究者による観察をもとにルール化したものであったが、機械学習を用いてその revise を試みたので当日報告する。

1. Shirai, H. *et al.* Biochim Biophys Acta 1844(11), 2002-15. (2014)
2. Kotarek, *et al.* J. Pharm Sci. 105:1023-7 (2016).
3. Kumar S and Kumar Singh S. Developability of Biotherapeutics CRC press (2016)
4. Kiyoshi, M. *et al.* PLoS One. 9(1) (2014).
5. Yoshida, K. *et al.* Sci Rep. 9(1) (2019).
6. Shirai, H. *et al.* PROTEINS 82(8):1624-35 (2014)
7. Kuroda D. *et al.* PROTEINS 73(3), 608-20. (2008)

「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」

Drug discovery research using AI: Challenge to automatic collection of
clinical information and knowledge processing

伊藤 真里

Mari Ito

国立研究開発法人・医薬基盤・健康・栄養研究所
AI 健康・医薬研究センター

ArCHER, National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

新薬の開発は、まず創薬ターゲット(標的)となる生体内のタンパク質を特定(発見)し、次にその標的に作用する物質を見だし、細胞や動物を用いる実験、臨床試験を経て申請・承認へと進む。近年、その費用が大幅に増加しているのにも関わらず、創出した新薬の数は増加していない。その原因の一つとして、ヒト臨床試験段階の Phase 2 で開発中止となる比率が高いことがあげられ、その中止理由の 6 割近くは、ヒトでの薬効を実証できない事によると報告されている。つまり、ヒトで有効な創薬標的の探索手法の変革が求められている。一方、ビッグデータの処理、ディープラーニングといった技術を創薬にも適用しようという動きは世界的に広がり、人工知能(AI)を活用する「AI 創薬」に注目が集まっている。

医薬健栄研では、2017 年度より、ヒト臨床における成功確度の高い創薬標的を見いだすため、「実験動物データ」を用いる従来の方法ではなく「対象疾患患者の実臨床データ」を収集、構造化して AI により解析する一連の手法構築に着手した。ヒト実臨床データの代表的な例として電子カルテが挙げられ、疾患の特徴を示す有用な情報がたくさん含まれている。しかしながら、電子カルテはあくまで診療・治療を目的としたものであり、AI に学習させることを想定したフォーマットになっていない。演者は、大阪大学医学部附属病院の協力を得て、問診や検査、治療結果に関する記述の多くを自由記載ではなく用語選択によって記録するテンプレート形式により入力を可能とし、さらに標準化された診察記録データがセキュアにオンラインで自動収集できるシステムと連動させた。加えて、自然言語によって自由記載されているテキスト情報を自然言語処理によって、上記テンプレートに自動抽出するシステムの構築にも着手した。

本講演では、この医薬健栄研が中心になって行っている「新薬創出を加速する人工知能の開発」プロジェクトおよび LINC(ライフインテリジェンスコンソーシアム)における「創薬テーマ創出」の取り組みについて、ヒト臨床情報の収集、活用における課題とともにその解決に向けての取り組みを中心に紹介する。

我が国が、最も誇れること、それは、緻密なデータ収集である。AI により様々なデータから仮説を生成する中で、新しいターゲットの発見や様々なプロセスの効率化がなされ、低コストで成功確度の高い創薬が可能になる。セキュアに医療ビッグデータや個人ヘルスケアデータが整備され、その利活用が進めば、創薬のみならず、疾患の早期発見、予防にもつながり、健康社会の実現に向けた新しい価値を提供することができるようになる。

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

Description of NGS data analysis workflows towards laboratory automation

尾崎 遼

Haruka Ozaki

筑波大学 医学医療系 / 人工知能科学センター

University of Tsukuba

超並列 DNA 配列決定技術である次世代シーケンサー (NGS) はゲノム科学におけるプラットフォーム技術である。転写 (RNA-seq) や転写因子の DNA への結合 (ChIP-seq) といった生命現象を塩基配列に変換し、NGS を用いて配列決定をすることで、ハイスループット計測を実現できる。その汎用性から現在も世界中で、多種多様な生命現象計測のための NGS 実験手法 (*-seq) の開発・改良が続けられている。そのような NGS データの解析では、解析の目的に応じて様々なソフトウェアを組み合わせ、多段階からなる解析パイプラインを組むことが一般的である。通常、ある段階のタスクを実現するソフトウェアが複数存在するため、組み合わせの数は選択枝の掛け算で増えていく。さらに、それぞれのソフトウェアについて複数のオプション設定の可能性が存在するため、その組み合わせは膨大になる。

このような状況では、NGS データ解析の再現性の担保が難しい。データ解析の結果は、ソフトウェアのバージョンやオプション、実行する OS、アノテーションデータのバージョン、データの前処理、およびそれらの組み合わせによって変化しうるにもかかわらず、生命科学分野の論文ではこれらの情報の記載が欠けていることが多い。また、インストールの際の依存性地獄 (Dependency hell)、ソフトウェアのバージョンの公開終了などに伴い、そもそも実行環境の準備のハードルが高くなり、誰も再現しなくなるといった別の問題も孕む。このような場合、導入の困難から、本当はソフトウェアを使いたい現場で使われないことにもなる????。生命科学研究におけるバイオインフォマティクス・データ解析の比重が増し続ける現在、この問題は解決が求められる。

そこで、データ解析パイプラインをどのように記述し、実行するかが課題となる。本発表では、近年にわかに注目を集めつつあるワークフロー言語 (Workflow language) について紹介する。ワークフロー言語は、データ解析の再現性を担保された形で記述するための言語である。ワークフロー言語は、ソフトウェアを表す素過程をノード、データの入出力関係を表すエッジからなる非巡回有向グラフとしてデータ解析パイプラインを表現する。このような記述に基づき、実際にデータ解析を実行するためのエンジンも並行して開発されている。さらに、コンテナ技術やクラウド技術との連携により、データ解析の再現性・可搬性・拡張性が実現される。発表では、我々のグループの取り組みにも触れつつ、国内外での NGS データ解析のワークフロー記述と現状と方向性について紹介する。

さらに、後半はこのワークフロー言語の発想をデータ解析のみならず、実験も含めた研究活動の自動化へ拡張する可能性について展望する。特に、データ解析とヒト/ロボット実験の相違点を整理しつつ、必要な開発課題について議論する。

SS-03

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 ー創薬テーマ創出から臨床への橋渡しと知識ベースー

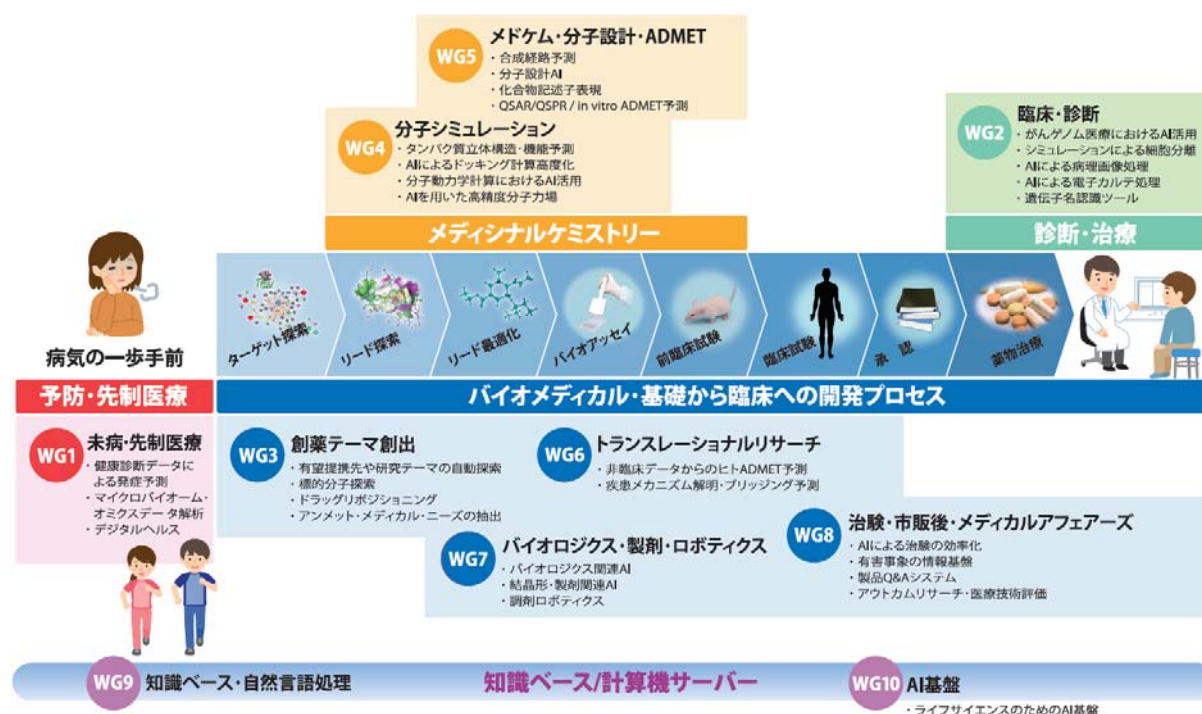
1 イントロダクション

医薬基盤健康栄養研究所 水口賢司

ライフインテリジェンスコンソーシアム（LINC）は、2016 年にライフサイエンス分野の人工知能（AI）並びにビッグデータ解析手法を開発することで当該分野の発展と人材育成、経済振興を目指すことを目的に発足し、2017 年 7 月から AI 開発活動を開始した。これまで、39 のプロジェクトが活動を行っている。現在、製薬企業等のライフ系企業 54 社、IT 系企業 44 社、アカデミア研究機関 16 機関、その他 9 機関の 620 名以上の研究者が参画している。

本セッションでは、LINC の活動（下図参照）のうち、昨年度のメディシナルケミストリーに引き続き、創薬テーマ創出を行っている WG03、トランスレーショナルリサーチを行っている WG06 及び知識ベースの開発を行っている WG09 での活動を紹介する。

シームレスなAI創薬プラットフォームをめざして



2 有望提携先や研究テーマの自動探索

東京電機大学大学院 井ノ上寛人、ジー・サーチ 長谷川均

我が国最大級の学術文献データベース JDreamIII のデータを用いて、研究者の媒介中心性を時系列解析することで、各著者の将来性を予測し、企業や研究テーマにとって最適な共同研究先を提案するビッグデータ・AI 開発について、学術面から社会実装にいたるまでを紹介する。

3 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

大正製薬 高橋俊哉

医療従事者、患者双方のアンメット・メディカルニーズ (UMN) を迅速に見出す AI モデルの開発を目指している。本学会では、患者ブログから、自然言語処理技術を応用して、不満、悩み、トラブルに関係する単語をてがかりに、UMN の探索・抽出を行う技術開発について紹介する。

4 Drug Sensitivity-Based Cell Line Selection

第一三共 池口茉莉恵

Predicting the clinical drug response of cancer patients using preclinical model has been a major challenge for precision medicine. Recent next generation sequencing (NGS) technologies have identified millions of genetic and epigenetic alterations in cancer cells, however, each individual data set have proven to be unsuccessful for the inference of drug response even in vitro studies. Here, we introduce our attempt to establish a computational model to predict drug response of cancer cell lines using the integrated omics data with Graph Convolution Network (GCN).

5 Understanding subtype specific mechanisms of TCGA gastric cancer using Bayesian network estimation

みずほ情報総研 谷村直樹

Finding molecular subtypes of cancer and clarifying disease mechanisms of each cancer subtype are the key factors in establishing new therapeutic targets. Here we tried to stratify gastric cancer of The Cancer Genome Atlas (TCGA) with integrative non-negative matrix factorization (iNMF) of multi-omics data and successfully stratified gastric cancer cases into several subtypes similar to ones previously reported by TCGA research group. Next we tried to find mechanisms of disease from gene expression data of each subtype with Bayesian network estimation. We found different hub genes and network model for each subtype.

6 創薬 AI 研究のための知識ベース構築に向けて

医薬基盤・健康・栄養研究所 長尾知生子

ライフサイエンス分野におけるデータ活用と AI 開発の促進に向けて、LINC の WG09 PJ30 で行ってきた活動について報告する。具体的には、創薬 AI の開発に必要なデータの調査と収集に関する活動や機械可読性の問題のために十分に活用されていない医薬品関連文書の構造化の検討などについて紹介する。

10月28日（水）

CH2 **チャンネル2**

＜企業セッション＞

ES-07 株式会社Elix	14
『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-』	

＜スポンサードセッション＞

SS-02 富士通株式会社	16
『デジタルラボトリプラットフォーム構想における研究自動化』	

株式会社 Elix は 最新の技術で AI 創薬を支援する テクノロジー企業です



ELIX

Elix は 2016 年 11 月に創業し、東京・シンガポールに拠点を持つ、ディープラーニングに特化したテクノロジー企業です。

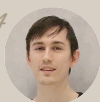
英語を公用語とし、優秀な AI エンジニア・AI リサーチャー、生物学者、化学者、物理学者を世界中から集めることで、高い研究開発力・技術力を実現しています。

最新の研究結果をいち早く産業に応用することで、みなさまのビジネスに貢献してまいります。

Channel
2

10月 28日(水) 13:00~14:30

4 人のスピーカーが弊社サービスおよび最新の取り組みをご紹介します

- | | |
|--|---|
| <p>01 </p> <p>結城 伸哉 (代表取締役 CEO)</p> <p>「Elix における AI 創薬事業紹介と最新研究動向」</p> | <p>02 </p> <p>Nazim Medzhidov (リサーチエンジニア)</p> <p>“Predicting inhibitors for SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA polymerase using machine learning”</p> |
| <p>03 </p> <p>Jun Jin Choong (AI エンジニア)</p> <p>“Generative Models for Molecular Design”</p> | <p>04 </p> <p>Romeo Cozac (AI エンジニア)</p> <p>“Deep Learning for Retrosynthetic Route Planning”</p> |

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

3 つの特徴

①期間短縮&コスト効率

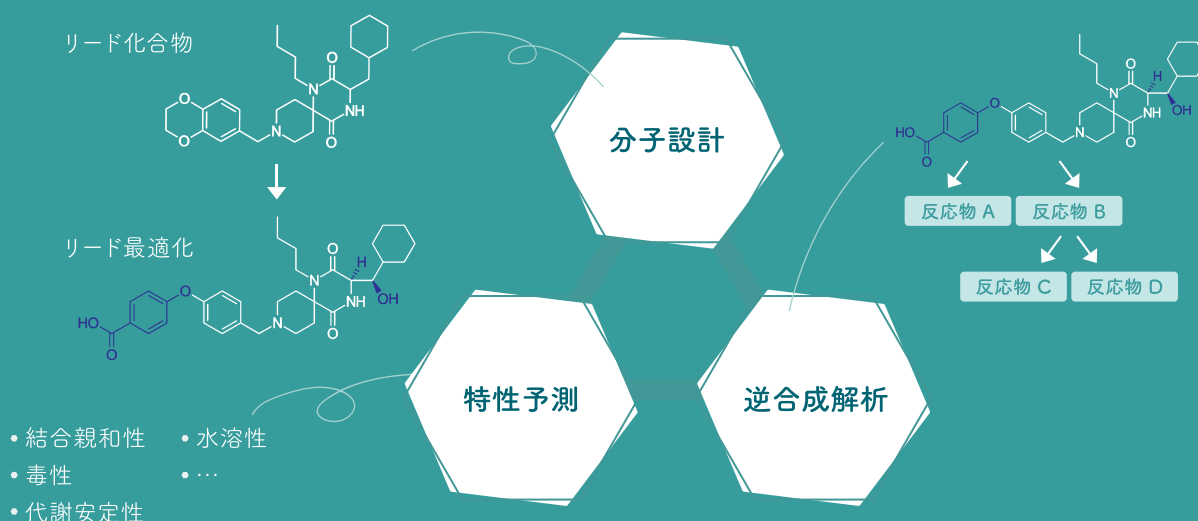
最先端のモデルで高速に特性予測・構造発生を行うことにより、開発期間を短縮できます。

②新規性

人間が思いつかない構造を発生させることで、化学者を支援します。

③サポート

最先端の技術を有する弊社研究者・エンジニアがしっかりとサポートします。



契約形態

ライセンス

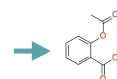
共同研究

#01

分子設計（生成モデル）

Generative models

モデル



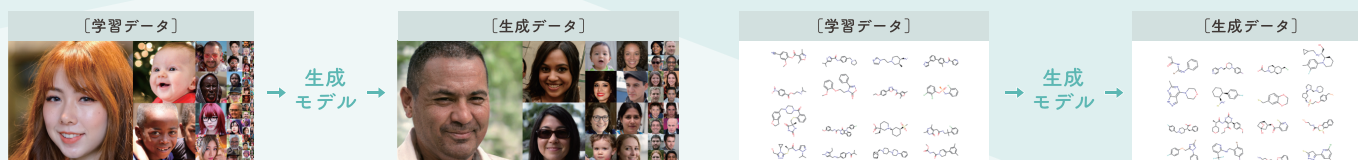
候補化合物の生成

- 生成モデルと呼ばれるモデルにより、候補化合物を生成します。
- 学習データと似ているが異なる新しい化合物をコンピュータ上で生成できます。

化合物の最適化

- 単に生成するだけでなく、所望の特性を持たせることも可能です。
- 化合物の最適化や特定の部分構造を固定したうえでの最適化も可能です。
- 人間（化学者）が思いつかない新規の分子構造を提案できる可能性もあります。

生成モデルは画像生成によく用いられますが、弊社では分子生成に応用しています。



#02

特性予測（予測モデル）

Predictive models



モデル

予測値

高速

- 実験やシミュレーションは非常に時間がかかります。
- 典型的事例ではシミュレーションの 10 万倍の高速化が可能です。
- 候補化合物を効率よくスクリーニングすることが可能です。

実験やシミュレーションとの組み合わせ

- 予測モデルでスクリーニングすることで、良い特性が出ている化合物のみを実験することができ、効率化に繋がります。
- 実験やシミュレーションから得られたデータを追加学習データとして利用し、さらに予測モデルの精度向上が可能です。

#03

逆合成解析

Retrosynthesis models



モデル



合成可能性

- 生成モデルから提案された化合物が合成可能とは限りません。
- 合成するためにはまず合成可能性を検討する必要があります。

効率的な探索

- 膨大な合成経路パターンから、最適な合成経路を予測します。
- 機械学習ベースの独自アルゴリズムにより、効率よく高速に探索します。

◆ 弊社の主要取引先・研究機関・採択プログラム

京都大学大学院
医学研究科

BRIDGESTONE



昭和電工株式会社

NIPPON
SHOKUBAI株式会社三菱ケミカル
ホールディングスHONDA
The Power of Dreams

KONICA MINOLTA

CAC

株式会社シーエーシー

Blockbuster
TOKYO

NVIDIA

INCEPTION PROGRAM



株式会社 Elix

〒102-0081 東京都千代田区四番町 8-34 第2 東郷パークビル 3 階

<https://www.elix-inc.com/jp/>info@elix-inc.com

SS-02

日時：10月28日（水）14:45-16:15

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 Laboratory Automation based on Digital Laboratory Platform Concept

開催趣旨

富士通の提唱するデジタルラボラトリプラットフォーム(Digital Laboratory Platform:以下 DLP)構想は、研究活動によって生じる全ての研究情報をデジタル化することを通じて、“研究業務の効率改善”及び“AI やビッグデータ解析の導入促進”を可能にするコンセプトである。

新型コロナウイルス感染症拡大の環境下において、“研究業務の効率改善”の重要な部分を担う研究自動化に注目が集まっている。DLP は、自動化を実現する機器を IoT 機器として取り扱うことによって研究実施と同時に実施記録を取得する設計思想を有しており、単なる研究業務の代行を超える価値を追求している。

本セッションでは、具体的な事例として弊社が長年培ってきた研究情報管理技術と近年低価格化/小型化/軽量化が進展しているロボット技術（デンソーウェーブ製 COBOTTA）を組み合わせたプロトタイプの実装イメージ、及びその他の自動化機器として電子ペーパー、VR（仮想現実）技術の使ったソリューションも併せて紹介する。セッションの最後には研究自動化を促進するアイデアの共有を目的に研究自動化の有識者を交えたディスカッションをおこなう。

デジタルラボラトリコンセプトの紹介： 富士通株式会社 萩原稔

化学・材料・医薬分野の R&D ソリューションに向けた新たなソリューションであるデータ駆動型デジタルラボ「デジタルラボラトリプラットフォーム」(Digital Laboratory Platform)コンセプトのご紹介

人協働ロボット「COBOTTA」の特長と事例紹介：株式会社デンソーウェーブ 植木隆太様

卓上サイズの人協働ロボット「COBOTTA」の特長である、「safety design」「portable body」「easy to use」「open platform」と、研究室等での活用事例をご紹介します

研究業務への協働ロボット実装検討： 富士通株式会社 久保木俊彦

協働ロボットを使って、データ収集・処理・解析の仕組みを自動化し、作業効率とデータ整合の改善を目指したプロトタイプモデルのご紹介

創薬研究 Virtual Reality 技術および電子ペーパーの紹介： 富士通株式会社 原田明彦

創薬研究 Virtual Reality ソフトウェア Nanome および研究活動中に生じる“紙”の発生を最小限にすることで電子ペーパーのご紹介

フリートークセッション： 座長 富士通株式会社 原田明彦

研究自動化の普及促進をテーマに、システムインテグレータ、ロボットなどの各分野の有識者の方によるフリーディスカッションをおこないます。

※詳細は未定のため、当日ご案内します。



Concept イメージ



10月28日（水）

CH3

チャンネル3

<企業セッション>』

- ES-08** 株式会社富士通九州システムズ 19
『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』

<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） 21
- SP-05** 『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－』 23

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

株式会社富士通九州システムズ

日時：2020年10月28日（水）13:00 – 14:30

研究開発支援システムの開発およびAMED事業「創薬支援インフォマティクスシステム構築」の 取組みについて

松下 まゆみ（株式会社富士通九州システムズ）

弊社では創薬・化学・材料分野の研究開発支援システムの開発から販売までを行っております。

AMED 事業に参画する事で、自社開発のみならずプロジェクト内のノウハウや専門性を反映した製品開発を進めております。弊社製品の中から、「AI 創薬基盤(仮称)」、「計算化学統合プラットフォーム SCIGRESS」をご紹介します。

AI創薬基盤（仮称）のご紹介

古賀 裕美（株式会社富士通九州システムズ）

国立研究開発法人日本医療研究開発機構が、「オールジャパンでの医薬品創出プロジェクト」の一環として、創薬支援ネットワークによる支援機能を強化するために、2015 年度から 5 か年の計画で「創薬支援推進事業—創薬支援インフォマティクスシステム構築—」が実施されました。当社はこの研究成果の一部を活用し、薬物動態と毒性を中心としたインシリコの統合解析プラットフォーム（データベース、モデル構築、予測機能から成るシステム）を構築し、2021 年 1 月に商用版としてリリースします。

本セッションでは製品リリースに先駆けて、本製品の概要や、医薬基盤・健康・栄養研究所、理化学研究所、明治薬科大学の各研究機関において構築されたモデル、および国内製薬企業（7 社）からの協力を得て構築されたモデル、自社データを活用した予測モデル構築手順についてご紹介します。

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

石川 慧（株式会社富士通九州システムズ）

SCIGRESS は原子・分子レベルの微細な挙動や性質を解析するシミュレーション・ソフトウェアです。低分子、高分子、結晶、アモルファスなど多岐にわたるモデリング機能や、分子軌道法、分子動力学法、密度汎関数法など様々な計算化学の手法を搭載し、新材料、新素材の研究開発を支援します。

本セッションでは、幅広い適応分野に対応可能な SCIGRESS をマテリアルズ・インフォマティクスにどのように活用できるのか、その取り組みについてご紹介します。

<開発元・お問い合わせ先>

株式会社 富士通九州システムズ 未来社会ソリューション本部 ソーシャル ICT ソリューション部

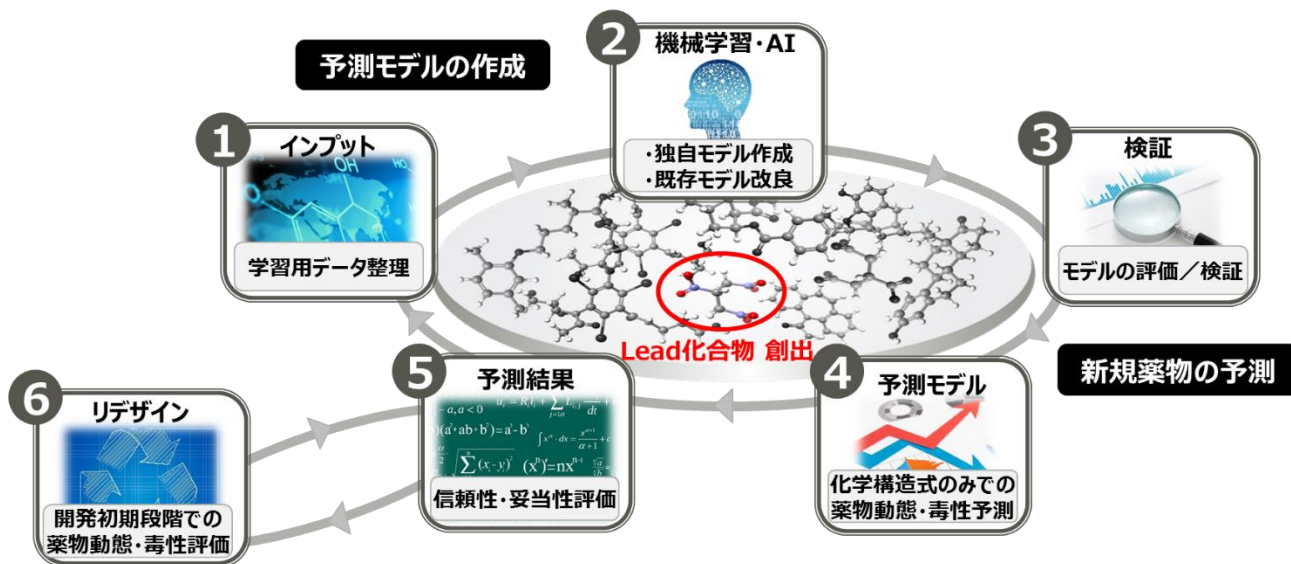
E-mail : fjqs-ccs@cs.jp.fujitsu.com

URL : <http://www.fujitsu.com/jp/group/kyushu/solutions/industry/lifescience/>



AI 創薬基盤（仮称）

薬物動態、毒性の予測により、効率的に候補化合物を絞り込みます。また、化学構造式から予測できるため、創薬初期段階から安全性・薬物動態を評価でき、製品開発のスピードアップ、安全性を考慮した製品開発を支援します。



計算化学統合プラットフォーム SCIGRESS

原子・分子レベルの微細な挙動や性質を解析するシミュレーション・ソフトウェアです。

分子力学法、非経験的分子軌道法、半経験的分子軌道法、密度汎関数法、分子動力学法、第一原理計算など、様々な計算化学の手法を搭載し、新材料、新素材の研究開発を強力に支援します。

■ 実験研究者でも簡単 GUI で手軽に計算が可能。使いやすさと高機能、拡張性を実現

- ・ 富士通が独自開発、30 年以上の開発実績
- ・ 日本人研究者のための日本語 GUI & 日本語サポート
- ・ 簡単で直観的な GUI と広範な機能で、幅広い分子シミュレーションを容易に実現

SCIGRESS の機能と利用環境の紹介。

モデリング機能 共有コンポーネント

- HOMO/LUMO 計算
- 紫外-可視スペクトル
- 化学反応解析

計算エンジン 富士通

- MD-ME
- MO-G, MO-S
- Gaussian
- MOPAC
- ADF
- CONFLEX
- GAMESS
- LAMMPS
- PHASE/0
- Quantum ESPRESSO

ソフトウェアベンダ

アカデミア・オープンコミュニティ

試薬・色素

- ガラス転移点
- 屈折率
- 弾性率

ポリマー

- バンド計算、状態密度計算
- 欠陥
- 結晶成長

半導体

- イオン伝導・拡散
- 電解質の分子間相互作用
- 電極反応

電池

- 界面反応機構
- 表面吸着
- 酸化還元

触媒

- 液晶セルビルダー
- 分子配向
- 相変化

液晶

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)

開催趣旨:

2017 年 6 月からスタートした経済産業省研究開発事業である本プロジェクト（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）は本年度で 4 年目となり具体的な成果が着々と得られつつある。本セッションでは、上記プロジェクトの具体的な進捗状況および今後の展開を中心に概説し、あわせて国内外の計算科学的手法による毒性予測手法の現状や、OECD における最近の動向について紹介する。

モデレーター: **植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa**
明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University

1. プロジェクトリーダー挨拶

船津 公人 Kimito Funatsu
東京大学 The University of Tokyo

2. 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
Mechanism-based toxicity prediction system for rat repeated-dose toxicity in the AI-SHIPS project

○**吉成 浩一 Kouichi Yoshinari、北島 正人 Masato Kitajima**
静岡県立大学 University of Shizuoka、(株)富士通九州システムズ Fujitsu Kyushu Systems Limited

AI-SHIPS プロジェクトでは、有害性評価支援システム統合プラットフォーム（HESS）に搭載されている毒性試験結果を活用して、化学物質の物理化学的特徴量である分子記述子に加えて、毒性発現機序に関わる各種インビトロ試験の結果を説明変数として利用したラット反復投与毒性の予測モデルを開発している。予測するエンドポイントは、反復投与毒性試験でしばしば認められる肝毒性、腎毒性、血液毒性である。最終的には、開発した毒性予測モデルと毒性試験データベースをソフトウェアとして提供する予定である。この中では、化学構造だけでなく毒性関連情報に基づく類似性検索機能を搭載することでリードアクロス等をサポートし、化学物質の開発や規制に貢献することを目指している。本講演では、インビトロ試験選択、インビボ毒性予測モデル構築、ソフトウェア開発等の現状を紹介する。

3. 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

Physiologically Based Pharmacokinetic Models Predicting Renal and Hepatic Concentrations of Industrial Chemicals after Oral Doses in Rats

山崎 浩史 Hiroshi Yamazaki
昭和薬科大学 Showa Pharmaceutical University

一般化学物質の消化管、肝臓、全身循環血および腎臓からなる生理学的薬物動態モデルの開発にむけ、経口投与後の動物生体内動態に関する文献情報を収集した。ケミカルスペース上の多様性を確保した一般化学物質のラット血中濃度推移を再現するため、消化管（吸収速度）、全身（分布容積）および肝（代謝消失速度）を個別に決定した。これら重要薬物動態パラメータを検討対象物質の構造データから予測するモデル式を構築、評価中である。物質数は限定されるが、臓器毒性の指標の一つとなりうる化学物質の経口吸収後の肝あるいは腎中物質濃度推移が、ある程度推定できうるようになった PBPK モデル手法の開発現状を報告する。

4. 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

Current status and issues of toxicity prediction system development by in silico methods

庄野 文章 Fumiaki Shono

東京大学 The University of Tokyo

最近の工業用途の化学物質開発においては高機能・高付加価値の素材をいかに迅速に開発しユーザーのニーズに応えられるかというスピードとあわせて環境負荷およびヒトの健康リスクの低い製品開発が求められる。しかしながら一方で長期間にわたる低用量の暴露によるリスク評価は反復投与毒性試験等長期、高額の評価手法で実施せざるを得ない状況にある。刺激性や皮膚感作性あるいは急性毒性試験はすでに一定の優れた計算科学的予測手法が開発されているが慢性毒性等反復投与毒性の予測手法はそのメカニズムの複雑性等から国際的にもその手法は確立されていない。本稿では直近の国内外の計算科学的手法開発の現状を紹介し、課題についてもふれたい。

5. OECD におけるコンピューターモデルの行政的な受け入れ

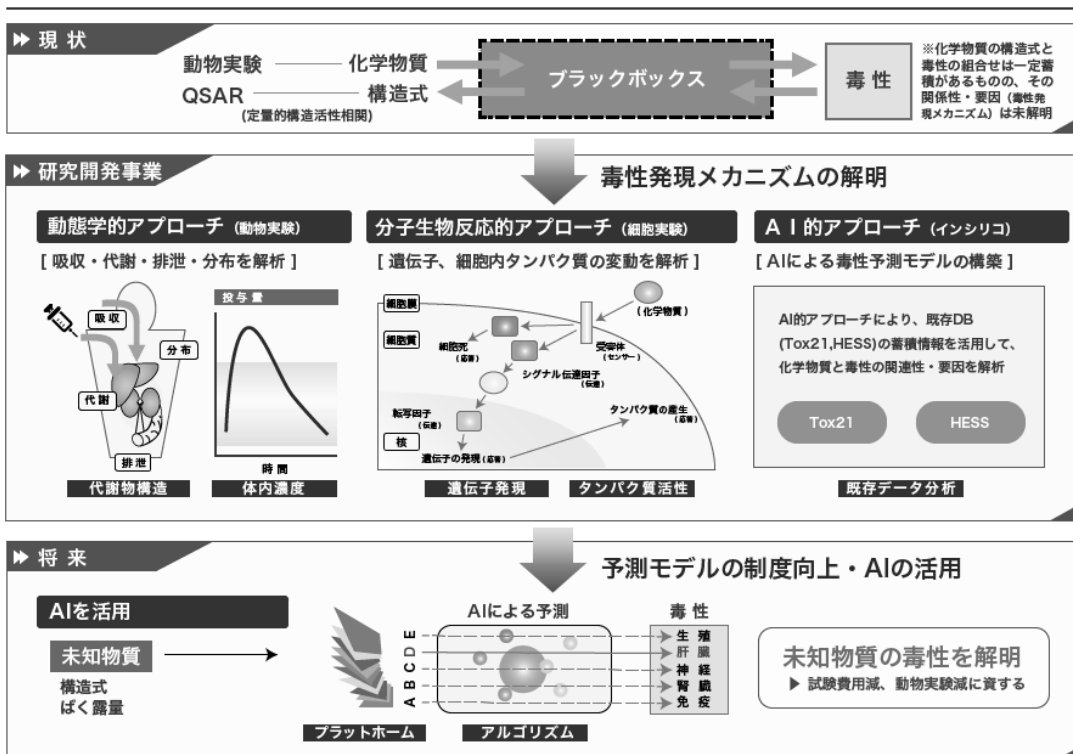
Computational methods for regulatory use in OECD

小島 肇 Hajime Kojima

国立医薬品食品衛生研究所 National Institute of Health Sciences

The OECD QSAR Toolbox1 is software designed to support hazard assessment of chemicals in a cost-efficient way. It is intended to be used by governments, chemical industry and other stakeholders. However, it is not available for this data as well as mathematical operations regarding regulatory decision. This year, OECD starts to discuss a development of the guidance document on Good Computational Method Practice (GCMP) in the context of Mutual Acceptance of Data (MAD) to ensure alignment with the overarching principles of Good Laboratory Practice (GLP).

AI-SHIPSプロジェクトの概要



高機能細胞デバイスを用いた生体模倣モデルの開発
ー薬物動態を指向した活用法を考えるー
Development of in vitro human body/tissue-mimicking model
using high functional cell devices
ー Consideration for pharmacokinetic-oriented applications ー

開催趣旨:

試験期間の短縮や動物実験の代替の流れから、ヒト化 in vitro 試験系の開発が盛んになっている。Microphysiological Systems (MPS、生体模倣システム) という呼称も浸透しつつある。Organs-on-a-chip は、スライドガラスからマルチウェルプレートのサイズの培養器に配置された複数の培養コンパートメントに様々な臓器由来細胞を培養し、培地を循環させることで生体環境を in vitro で再現しようとする新規の培養技術である。特に、動物試験を主としてきた医薬品/化粧品開発における次世代の評価系として、製薬企業をはじめとして、世界のライフサイエンス業界がその研究の動向に注目している。昨年度は、より生体に近い in vitro 試験系としての MPS の開発の動向を報告したが、本年度は MPS の実用化を目指した薬物の体内動態予測への応用の可能性について、最先端の研究成果をご報告いただく。

モデレーター: 石田 誠一 Seichi Ishida

崇城大学 生物生命学部 応用生命科学科

国立医薬品食品衛生研究所

Department of Applied Life Science, Faculty of Biotechnology and Life Science

Sojo University

National Institute of Health Sciences

樋坂章博 Akihiro Hisaka

千葉大学大学院 薬学研究院 臨床薬理学

Clinical Pharmacology and Pharmacometrics, Graduate School of Pharmaceutical

Sciences, Chiba University

1. 多臓器型 Microphysiological system を用いた薬剤相互作用の検討
Drug-drug interaction studies using a multi microphysiological system

木村 啓志 Hiroshi Kimura

東海大学 工学部機械工学科

Department of Mechanical Engineering, School of Engineering, Tokai University

近年、創薬プロセスにおける新規医薬品候補化合物の薬効・安全性評価手法の一つとして、マイクロ流体デバイス技術を活用した生体模倣システム (Microphysiological system、以下 MPS) が世界的に注目されている。この MPS を使って細胞を培養する場合、液性因子を時間的・空間的に制御できること、流れや伸縮による物理刺激を付与できることなど、従来の実験系では不可能であった様々な培養条件を試すことが可能であり、極めて操作性の高いシステムを構成できる。特に iPS 細胞とその分化誘導手法の発展により、MPS 技術を活用した創薬のための組織モデルや疾患モデルの開発、さらには in vitro 臨床試験といったことも議論され始めるに至っており、MPS は薬物動態や毒性を in vitro でテストする新規のアッセイプラットフォームとして大きく期待されているところである。我々の研究グループでも、MPS 研究の黎明期から肝臓や小腸、腎臓といった薬物動態に関連する臓器のモデルとしての MPS や、これらの臓器の機能を一つのチップに集積化した多臓器型 MPS を開発し、薬物動態試験への活用を模索してきた。本公演では、我々がこれまでに開発を進めてきた多臓器型 MPS の概要と、これを用いた薬剤相互作用の検討について紹介する。

2. 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

Evaluation of drug disposition and organs interaction using entero-hepatic microphysiological system

荒川 大、河西 巧、加藤 将夫 Hiroshi Arakawa, Takumi Kawanishi, Yukio Kato

金沢大学医薬保健研究域薬学系

Faculty of Pharmacy, Institute of Medical, Pharmaceutical and Health Sciences, Kanazawa University

近年の医薬品開発コストが飛躍的に増加している一方、薬効が不十分であったり、毒性発現による医薬品開発の失敗がその要因となっている。薬効や毒性は血中あるいは組織中の薬物濃度と密接な関わりがあることから、より予測精度の高い新規薬物動態評価系への期待が高まっている。特に、近年 Microphysiological systems (MPS) は、生体に近い *in vitro* 細胞培養系として、ヒトにおける薬物応答予測への応用が期待される。一方で、薬物動態や毒性予測に用いる場合、薬物や毒物の主要代謝酵素について、発現量や活性、*in vivo* との相同性などの特徴づけが求められるものの、MPS での定量的な薬物動態解析例は未だ限られている。我々は、産総研で開発された圧力駆動型循環培養システムを用い、腸管と肝臓のモデル培養細胞が連結された MPS を用い、薬物代謝の定量的な解析を試みた。本シンポジウムでは、我々の研究事例を中心に MPS の薬物動態評価について報告する。

3. 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 Strategies for *in vivo* extrapolation from data obtained in micro-physiological system by physiologically-based pharmacokinetics

樋坂 章博 Akihiro Hisaka

千葉大学大学院 薬学研究院 臨床薬理学

Clinical Pharmacology and Pharmacometrics, Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Chiba University

iPS 細胞などの高機能性細胞の技術の発達で、生体に近い複数の活性を有する細胞系が実現し、その組み合わせで複数臓器の連関をチップ上に再現する、いわゆる生体模倣システム(MPS)が実現しつつある。その完成で、*in vitro* から *in vivo* の予測(IVIVE)の精度が高まると、私も含め誰もが期待している。しかし、MPS が完成すれば実験結果が直ちに生体の機能を反映するので、PBPK モデル解析は不要になると考えるのであれば、残念ながら全くの誤りである。なぜなら、酵素活性を理想的に再現しても、臓器内の細胞の配置、血管構造や血流の組成や量が生体と異なると、臓器としての機能は全く異なるからである。また仮にそれらを理想的に制御しても、スケールが違えば時間推移は大きく異なってしまう。現実には、酵素活性の理想的再現は容易ではなく、そのような細胞を複数種類、同時に再現性良く培養するのも非常に難しい。したがって、MPS を用いた予測にも、PBPK 理論に基づく精密な補正が必ず必要なのである。このときに、PBPK 理論は活性を個別に扱うので、そのままだと MPS で評価しても従来法に比べ、実は何ら精度の向上が望めない。MPS の特徴を活かすには、これまでの IVIVE とは異なる解析戦略が必要であることをこの講演で述べる。

10月28日 (水)

CH4 チャンネル 4

<企業セッション>』

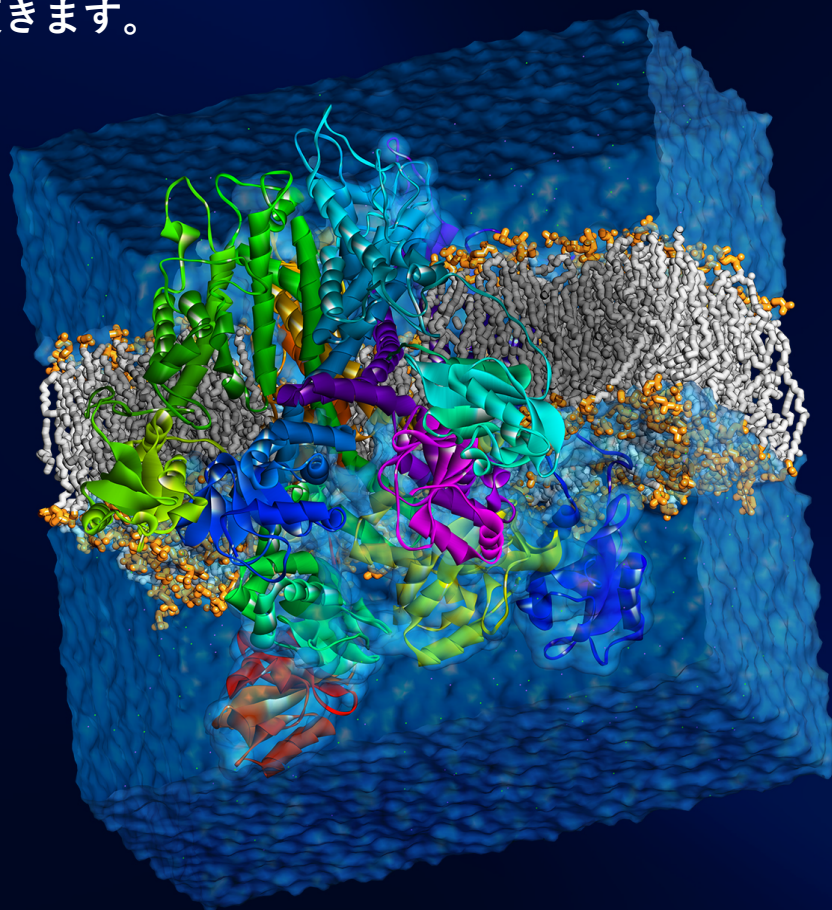
ES-09	ダッソー・システムズ株式会社.....	26
	『BIOVIA の最新科学』	

<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-	28
FS-04	オミックスの原理研究会	29

BIOVIA の最新科学

本セッションでは、創薬向け in silico ツールとして
近年 BIOVIA ポートフォリオに追加された新製品 / 新機能について
ご紹介させていただきます。



① Discovery Studio 2020 新機能のご紹介

Discovery Studio 2020 は、バージョン 2020 としてリリースされた一連の BIOVIA 製品の一つで、バイオ医薬品やシミュレーション、低分子究などの分野における重要な科学的進展が実装されています。本日は主な新機能として以下についてご紹介させていただきます。

1) Multi-Site Lambda Dynamics (MSLD)

一度のシミュレーションで複数のリガンドの相対的結合自由エネルギーを精度よく計算できる MSLD が、商用ソフトウェアとしては初めて Discovery Studio に搭載されました。

2) 露な脂質二重層膜を用いたシミュレーションのサポート

膜タンパク質に対して脂質膜や水、カウンターイオンから成るシステムを構築し、シミュレーションを行うことが可能になりました。

3) 生物製剤の溶解度や粘度を予測する新たなプロトコル

Calculate Protein Formulation Properties プロトコルによって、複数のタンパク質の物性を計算、比較できるようになりました。

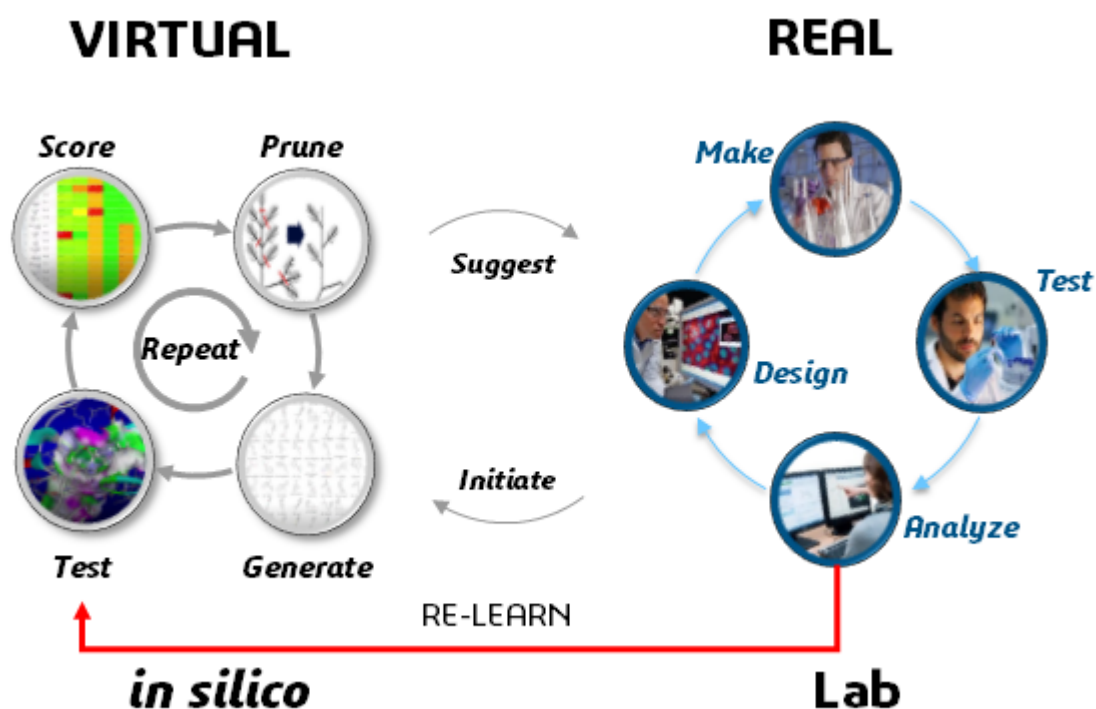
4) 新たなファーマコフォアモデル構築手法

いわゆる弱い相互作用を含むタンパク質-リガンド間非結合相互作用を基にファーマコフォアを自動生成 / 検証するプロトコルや、一連の大規模な活性 / 非活性リガンドからアンサンプル・ファーマコフォアを生成するための新たなプロトコルが追加されました。



リード化合物の最適化には平均 5 年で 3 0 0 0 ～ 6 0 0 0 化合物の合成が必要になります
 ダッソー・システムズ BIOVIA は AI と機械学習で、この課題に取り組みます！

BIOVIA Generative Therapeutics Design (GTD) は、AI を活用し、合成する前段階でのリード化合物の最適化を支援します。
 バーチャルで化合物を発生・評価し、合成する化合物の選抜を自動的に行うことで、コストがかかる実際の合成を最適化します。



Generative Therapeutics Design を使ったイノベーションサイクル

GTD のイノベーションサイクルは、アクティブラーニングを使って新しい化合物をデザインすることで、バーチャルとリアル (V+R) でリード最適化を行います。AI や機械学習でバーチャルなリード候補化合物を選抜し、それを実際に合成し、テスト結果を使ってよりよい機械学習モデルを作成します。このサイクルは、目的活性だけでなくアンチターゲット、安全性、毒性など、すべての目的のターゲットプロファイルを満たすまで繰り返されます。

GTD を採用いただくことで、研究領域でのビジネス革新を実現し、探索フェーズの時間短縮、臨床段階での成功確率の上昇、結果として貴社に莫大なコスト削減をもたらします。

動きを見つめる中性子

ー活性サイトの水素からドメイン相関・解離会合までー

Neutron Probing Dynamics of Biomolecules, *from Hydrogen at Active Site to Domain Correlation*

開催趣旨:

「中性子」と聞いて、皆さんは何が浮かべられるでしょうか？もし「水素を見る手法」というイメージが浮かべてくださった方がおられたら「中性子」にお詳しい方です。しかし、現在の中性子散乱・回折法は水素を見るだけではありません。X線には無い同位体効果・スピンさらにエネルギーレンジの特性を生かして、生体高分子における活性サイトの水素からドメイン相関・解離会合までを捉える手法として発展しつつあります。これには近年、J-PARC をはじめとする世界中で建設・運用が開始された高強度中性子源における高精度分光器の開発と測定データを可視化する計算機科学による解析法の発展が大いに寄与しています。そこで、本セッションでは、中性子科学と計算機科学の最先端で研究を展開している方を講師にお呼びし、最新の中性子回折・散乱の成果と計算機科学を用いた中性子データの解析法を紹介していただきます。そして、皆さんと「中性子で何が見えるか？」を共有し、発展途上である「中性子構造生物学」の今後について議論させて頂きたいと考えております。

モデレーター: 杉山 正明 Masaaki Sugiyama

京都大学 Kyoto University

玉田 太郎 Taro Tamada

量子科学技術研究開発機構

National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

1. 酵素の基質特異性に関わる水素原子の観察

中村 照也 Teruya Nakamura

熊本大学 Kumamoto University

酵素は生命現象において重要な化学反応を触媒するタンパク質であり、その基質認識・反応機構を真に原子レベルで理解するには、酵素活性部位の水素原子を実験的に観察することが必要不可欠である。本講演では、高分解能 X 線・中性子結晶構造解析により明らかにした水素原子が関与する酵素の幅広い基質特異性の構造学的基盤について紹介する。

2. 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

井上 倫太郎 Rintaro Inoue

京都大学 Kyoto University

中性子散乱における一つの大きな特徴として同位体識別能が挙げられ、特に生体高分子に多く含まれる水素において絶大な威力を発揮する。この特徴を生かすことで、生体高分子複合体において特定の生体高分子のみの可視化できるコントラスト変調法が可能となる。本講演では、この手法を積極的に活用することで特にタンパク質複合体の解離会合現象の可視化法について紹介する。

3. 中性子散乱データを活用した超分子のモデリング

河野 秀俊 Hidetoshi Kono

量子科学技術研究開発機構

National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

複数のタンパク質や核酸から構成される超分子の立体構造の決定は依然として難しい。構成要素分子個々の立体構造が分かっていたとしても、それらがどのように空間的に配置されているのか、また、相互作用によってどのように構造変形をするのか、といったことを考慮しての分子モデリングは、膨大な計算量を要する。X線・中性子散乱データは、計算から出てきた候補モデルを絞り込みに有効である。本講演では、X線・中性子散乱データを活用した超分子のモデリング方法と構築したモデルの評価について我々のアプローチを紹介する。

「オミックスの原理」研究会 “Omics Principles” Committee

開催趣旨:

ゲノム解析技術の発展により種毎あるいは個人毎の全ゲノムは確実に得られるようになりました。そのことのインパクトは大きく、個々の遺伝子や変異などについて重要な情報が得られるようになりました。しかし、生物全体がどのように設計されているか? という原理は、依然分からない状態です。全ゲノムが次々と解析されている現在、「原理的な問題」が最も喫緊の課題と考え、この委員会を立ち上げました。今回の FS は、研究会のキックオフとして行うもので、多くの方々に参加していただきたいと思います。

モデレーター: 美宅 成樹 Shigeki Mitaku

名古屋大学名誉教授 Nagoya University, emeritus professor

広川 貴次 Takatsugu Hirokawa

産総研創薬プロファイリング研究センター

荻島 創一 Soichi Ogishima

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

1. 設計図としての生物ゲノム配列の隠れた構造

美宅成樹 Shigeki Mitaku

名古屋大学名誉教授 Nagoya University, emeritus professor

生物ゲノム配列は遺伝子の集合体となっています。それをゲノム配列の表の構造とすると、同じゲノム配列にはもう一つの裏の構造が隠されています。コード領域全体について、コードンの位置毎のヌクレオチド組成を見てみると、裏の構造が見えてきます。「生命」とはどういう状態か、「生物多様性」とは何か、「種」とは何かなどについて、このゲノムの裏の構造から議論したいと思います。

2. 創薬研究から考えるゲノム情報

広川 貴次 Takatsugu Hirokawa

産業技術総合研究所 細胞分子工学研究部門

3. 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

荻島 創一 Soichi Ogishima

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