# CBI学会2022年大会

## Chem-Bio Informatics Society(CBI) Annual Meeting 2022

## 新しい医薬品の概念が変える医療
## ～次世代モダリティ、デジタルセラピー～

*New concept of medicine will change the medical care*

*～ New Modality and Digital Therapy ～*

会期：2022年10月25日（火）- 27日（木）

会場：タワーホール船堀（東京都江戸川区船堀4-1-1）

情報計算化学生物学会（CBI学会）

# CBI 学会 2022 年大会

# 新しい医薬品の概念が変える医療
# ～次世代モダリティ、デジタルセラピー～

会期： 2022 年 10 月 25 日(火)－27 日(木)
会場：タワーホール船堀（東京都江戸川区船堀 4-1-1）

CBI 学会 2022 年大会
大会長：
坂田 恒昭（大阪大学共創機構）
実行委員長：
福澤　薫　（大阪大学大学院薬学研究科）
プログラム委員長：
荻島 創一（東北大学 東北ﾒﾃﾞｨｶﾙ・ﾒｶﾞﾊﾞﾝｸ機構）
プログラム副委員長：
池田 和由（理化学研究所／慶應義塾大学）

---

Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2022

# "New concept of medicine will change the medical care
# ～New Modality and Digital Therapy～

Dates: October 25 (Tue) – 27 (Thu), 2022
Venue: Tower Hall Funabori (4-1-1 Funabori, Edogawa-ku, Tokyo)

Conference Chairperson
Tsuneaki Sakata (Osaka University)
Organizing Chairperson
Kaori Fukuzawa (Osaka University)
Program Chairperson
Soichi Ogishima (Tohoku Medical Megabank Organization)
Program Vice-Chairperson
Kazuyoshi Ikeda (RIKEN/Keio University)

CBI 学会 2022 年大会事務局
Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2022 Secretariat

# プログラム

10月24日(月)

| 日付 | 時間 | 小ホール（5F） | 研修室（4F） | 401 |
|---|---|---|---|---|
| **10月24日(月)** | **13:00 \| 17:00** | <市民講座><br>『分子ロボットと循環農工業：持続可能な未来を目指して』<br>司会：**山村 雅幸**（東京工業大学）<br>**小長谷 明彦**（東京工業大学名誉教授）<br>**大津 厳生**（筑波大学大学院）<br>**浜田 省吾**（東北大学）<br>**西田 暁史**（東京農業大学）<br>**吉田 省子**（北海道大学） | <チュートリアル><br>**TS-01 計算毒性学研究会「化学関連研究支援システムの理解、確認、適用」**<br>モデレーター：**湯田 浩太郎**（株式会社インシリコデータ）<br>講師：<br>**東田 欣也**（株式会社モルシス）「CLARITYおよびCLARITY PVによるトランスレーショナル・セーフティ・リサーチ」<br>**古賀 裕美**（富士通株式会社）「富士通が行う、AI創薬のための研究支援」<br>**結城 伸哉**（株式会社Elix）「AI創薬プラットフォームElix Discovery™の活用事例及びAI創薬最新動向」<br>講師交渉中（NVIDIA）「未定」<br>**湯田 浩太郎**（株式会社インシリコデータ）「データサイエンスと人工知能を併用した「マルチターゲット創薬」の実施」<br>**湯田 浩太郎**（株式会社インシリコデータ）「研究支援システム適用上での重要な留意事項」と閉会の挨拶 | <チュートリアル><br>**TS-02 第29回FMO研究会 「FMOデータベースの実践チュートリアル -生体高分子の認識機構解析：MD連携、核酸分子解析-」**<br>モデレーター： **加藤 幸一郎**（九州大学）、<br>**高谷 大輔**（大阪大学）、**渡邉 千鶴**（理化学研究所） |

# 10月25日(火)【1日目】

| 日付 | 時間 | 大ホール（5F） LIVE配信 | 桃源（2F） | 福寿（2F） | 平安（2F） |
|---|---|---|---|---|---|
| 10月25日(火) | 10:00<br>\|<br>10:10 | 開会式、会長挨拶 | | | |
| | 10:10<br>\|<br>10:30 | <大会長講演><br>**C-01 坂田 恒昭**（大阪大学共創機構）<br>「新しい医薬品の概念が変える医療」 | | | |
| | 10:30<br>\|<br>12:00 | <プレナリー講演><br>『ウィズコロナ社会におけるライフサイエンス』<br>座長：**坂田 恒昭**（大阪大学共創機構）<br>**P-01 永井 良三**（自治医科大学）<br>「情報化時代の医学研究」<br>**P-02 澤田 拓子**（塩野義製薬株式会社）<br>「新型コロナ感染症への挑戦 -シオノギ流ヘルスケア戦略と社会課題への取組み-」 | | | |
| | 12:00<br>\|<br>13:30 | | <ランチョンセミナー><br>**LS-01 株式会社Elix**<br>**結城 伸哉**「AI創薬最新動向とオールインワンAI創薬プラットフォーム Elix Discovery™のご紹介」<br>**波戸 園美**「オールインワンAI創薬プラットフォーム Elix Discovery™ライブデモ」<br>**井上 貴央**「分子構造生成モデルのクイックレビュー」 | <ランチョンセミナー><br>**LS-02 ドットマティクス株式会社**<br>『マルチモダリティ時代に対応する、進化したドットマティクスの化学・生物研究統合プラットフォームのご紹介』<br>**ゾルト レプ、福山 隆**(ドットマティクス(株)) | <ランチョンセミナー><br>**LS-03 株式会社モルシス**<br>『創薬モダリティ研究に向けたMOEの活用』<br>「PROTACを介した三元複合体モデリング」<br>「抗体設計アプリケーションとDevelopabilityの評価」<br>「核酸モデリング」 |
| | 13:30<br>\|<br>15:00 | <招待講演><br>『新たなモダリティー多様化時代へ』<br>座長：**小林 博幸**（塩野義製薬株式会社）<br>**I-01 小比賀 聡**（大阪大学大学院薬学研究科）<br>「架橋型人工核酸の開発とその核酸医薬研究への応用」<br>**I-02 石井 健**（東京大学医科学研究所）<br>「異所性核酸を起点とした生体応答研究と創薬」<br>**I-03 小泉 誠**（第一三共株式会社モダリティ研究所）<br>「難治性遺伝子疾患に対する核酸医薬品の創薬研究」 | <スポンサードセッション><br>**SS-01 クオンティニュアム株式会社**<br>『NISQ 時代における量子コンピュータを用いた研究および顧客事例』<br>「TKET（ティケット）：量子ソフトウェア開発キット」<br>「InQuanto（インクァント）：量子計算化学プラットフォーム」<br>「クオンティニュアム社について」 | <シンポジウム><br>**SP-01 国立研究開発法人 日本医療研究開発機構(AMED)**<br>『生命科学・創薬研究のシームレスな支援に向けたAMED-BINDSの取り組み』<br>モデレーター：**善光 龍哉**（AMED）<br>講師：<br>**小島 宏建**（東京大学）「東京大学の創薬リード創製支援」<br>**辻川 和丈**（大阪大学）「創薬サイエンス研究支援拠点におけるシームレスなBINDS創薬研究支援」<br>**由良 敬**（早稲田大学）「1細胞/微小組織マルチオミックスのオールインワン解析による生命科学研究支援」 | <大会企画セッション><br>**OS-01 新規医療モダリティとしてのデジタルセラピーの最前線**<br>モデレーター：**小島 真一**（田辺三菱製薬株式会社）、**山本 一樹**（東京大学）<br>講師：<br>**野田 恵一郎**（株式会社日本総合研究所）<br>「我が国に求められるデジタルセラピューティクスの社会実装の在り方」<br>**市川 太祐**（サスメド株式会社）「不眠障害における治療用アプリ開発」<br>**石井 洋介**（株式会社omniheal）「うんこでみるコミュニケーションデザインとDTxの未来」 |
| | 15:00<br>\|<br>15:30 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | | |
| | 15:30<br>\|<br>17:00 | <シンポジウム><br>**S-01 CBI研究機構 量子構造生命科学研究所**<br>『代謝酵素を対象としたSBDD手法の開発』<br>モデレーター：**上村 みどり**、**近藤 史郎**（CBI研究機構 量子構造生命科学研究所）<br>講師：<br>**上村 みどり**（CBI研究機構 量子構造生命科学研究所）<br>「量子構造生命科学研究所のプロジェクトとしてCYPに取り組む意味について」<br>**榊 利之**（富山県立大学）「医薬品の代謝予測および創薬ターゲットとしてのCYP」<br>**橋高 敦史、高野 真史、川越 文裕**（帝京大学）<br>「CYP24A1代謝に抵抗するVD3誘導体の合成化学」<br>**米倉 功治、濵口 祐、高場 圭章、川上 恵典、眞木 さおり**（理研/東北大学）「CYPを対象としたCryo-EM（仮題）」<br>**玉田 太郎、平野 優**（量子科学技術研究開発機構）<br>「CYPを対象としたX線＋中性子結晶構造解析の取り組み」<br>**杉山 正明**（京都大学）「溶液散乱によるCYPの溶液構造解析の展開」<br>**東田 欣也**（株式会社モルシス）、**栗田 典之**（豊橋技術科学大学）「CYPの計算化学的解析手法への期待」<br>**近藤 史郎**（CBI研究機構 量子構造生命科学研究所）<br>「おわりに」 | <スポンサードセッション><br>**SS-02 アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社**<br>『創薬研究におけるクラウド活用の実際～第一三共でのデータ駆動型創薬化学研究基盤～』<br>**中島 丈博**（アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社）「AWS サービスを活用したHigh Performance Computing (HPC) 環境の構築」<br>**国本 亮**（第一三共株式会社）「AWS サービスを活用したデータ駆動型の創薬化学研究基盤の構築」 | <シンポジウム><br>**SP-02 MPS（生体模倣システム）の今後の展開を考える -AMED-MPS2、MPS-RSプロジェクト開始にあたって-**<br>モデレーター：**石田 誠一**（崇城大学/国立医薬品食品衛生研究所）<br>講師：<br>**伊藤 弓弦**（筑波大学）「AMED-MPS2プロジェクトの概要のご紹介」<br>**石田 誠一**（崇城大学/国立医薬品食品衛生研究所）「MPS-RS事業の概要のご紹介」<br>**山崎 大樹**（国立医薬品食品衛生研究所）「in vitro試験法に求められるヒトへの外挿性について」 | <スポンサードセッション><br>**SS-03 エヌビディア合同会社**<br>『AI創薬・生命科学関連技術の進展とそれを支えるGPUソリューション』<br>**大上 雅史**（東京工業大学） |
| | 17:00<br>\|<br>19:00 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | | |

# 10月25日(火)【1日目】

| 時間 | 瑞雲（2F） | 研修室（4F） | 401 |
|---|---|---|---|
| 10:00-10:10 | | | |
| 10:10 \| 10:30 | | | |
| 10:30 \| 12:00 | | | |
| 12:00-13:30 | | | |
| 13:30 \| 15:00 | <口頭発表O1><br>**『創薬応用 (1)』**<br>座長：**加藤 幸一郎**（九州大学）、**増田 友秀**（東レ(株)）<br>**O1-1 Tatsuya Ishimoto** (Tokyo Institute of Technology) "Prediction of Chemical Reaction Type with Hierarchical Graph Neural Networks"<br>**O1-2 Shunya Makino** (Tokyo Institute of Technology) "Molecular Optimization by Graph Generative Model using Transformers"<br>**O1-3 Mami Ozawa** (Tokyo Institute of Technology) "An Enhanced Machine Learning Models for Predicting Retrosynthesis Accessibility"<br>**O1-4 Takamasa Suzuki** (Tokyo Institute of Technology) "Multi-Objective Molecular Optimization by Monte Carlo Tree Search"<br>**O1-5 Ryuji Kato** (Nagoya University, Tokai National Higher Education and Research System) "Morphology-based drug effect profiling for delicate label-free phenotypic screening"<br>**O1-6 Iori Azuma** (Laboratory of Molecular Pharmacokinetics, Graduate School of Pharmaceutical Sciences, The University of Tokyo) "A recommendation algorithm for predicting drug effects considering directionality" | <口頭発表O2><br>**『計算化学（分子認識）』**<br>座長：**髙岡 雄司**（ダッソー・システムズ(株)）、**広川 貴次**（筑波大学）<br>**O2-1 Keisuke Yanagisawa** (Tokyo Institute of Technology) "REstretto: An Efficient Protein-Ligand Docking Tool based on a Fragment Reuse Strategy"<br>**O2-2 Suyong Re** (National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition) "Binding specificity of phosphopeptide recognition domain analyzed by gREST simulation"<br>**O2-3 Shuhei Miyakawa** (Hoshi University) "Dynamical interaction analysis of Remdesivir with SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA polymerase by MD and FMO calculations"<br>**O2-4 Kazuma Harada** (Graduate School of Science and Engineering, Kindai University) "Analysis of interaction energies for SMAD4 variants by computational science"<br>**O2-5 Tatsunori Miyajima** (Kindai University Graduate School of Science and Engineering) "Interaction analysis of 14-3-3 and p53 using fragment molecular orbital method"<br>**O2-6 Yuuki Okayama** (Graduate School of Science and Engineering, Kindai University) "Comparison of conformer models in PDB structure using Fragment Molecular Orbital Method" | <フォーカストセッション><br>**FS-01 生命の起源：知性の発現**<br>モデレーター：**田中 成典**（神戸大学）<br>講師：<br>**島村 孝平**（熊本大学）「非平衡分布関数の時間発展による知性の記述」<br>**田中 成典**（神戸大学）「量子認知と意思決定の自由エネルギー理論」 |
| 15:00 \| 15:30 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | |
| 15:30 \| 17:00 | <口頭発表O3><br>**『計算化学（分子計算）/モダリティ/ADME・毒性』**<br>座長：**渡邉 博文**（(株)ウィズメーティス）、**北 竜士**（(株)カネカ）、**渡邉 怜子**（大阪大学）<br>**O3-1 Hiraku Oshima** (RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research) "Free Energy Perturbation Method in GENESIS"<br>**O3-2 Masatake Sugita** (Tokyo Institute of Technology) "Lipid composition is critical for accurate membrane permeability prediction of large cyclic peptides by molecular dynamics simulations"<br>**O3-3 Hiromitsu Shimoyama** (University of Tsukuba) ""Molecular Dynamics Study of 3D-DS dimerization of Cyt c"<br>**O3-4 Toru Ekimoto** (Yokohama City University) "Complex model of the bile acid transporter NTCP and binding peptides involved in the HBV infection explored by molecular dynamics simulation"<br>**O3-5 Takashi Matsumoto** (Rigaku Corporation) "MAXS for 3D molecular visualization of human antibody conformational changes"<br>**O3-6 YASUHIRO YOSHIDA** (University of Occupational and Environmental Health, Japan) "CrotBiopsy:New methods for lung inflammation" | <口頭発表O4><br>**『データサイエンス/バイオインフォマティクス』**<br>座長：**佐藤 朋広**（理化学研究所）、**夏目 やよい**（国研 医薬基盤・健康・栄養研究所）<br>**O4-1 Chiduru Watanabe** (RIKEN BDR) "Development of FMODB and Auto-FMO protocol through 2022"<br>**O4-2 Nobuaki Yasuo** (Tokyo Institute of Technology) "Hit Identification for SARS-CoV-2 Main Protease Using Convolutional Neural Network"<br>**O4-3 Haris Hasic** (Elix, Inc.) "Evaluating Computer-assisted Single-step Retrosynthesis: How Significant are Recent Improvements?"<br>**O4-4 Midori Iida** (Kyushu Institute of Technology ) "Developing a network-based combination therapy approach for complex diseases"<br>**O4-5 Takayuki Kimura** (Tokyo Institute of Technology) "Prediction of Protein Binding Region on RNA with Transformer and Attention Augmentation"<br>**O4-6 Chen Li** (Kyushu Institute of Technology) "Molecular Generation using Sequence-based Transformer Generative Adversarial Network" | |
| 17:00 \| 19:00 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | |

# 10月26日(水)【2日目】

| 日付 | 時間 | 大ホール（5F） LIVE配信 | 桃源（2F） | 福寿（2F） | 平安（2F） |
|---|---|---|---|---|---|
| 10月26日(水) | 10:00<br>\|<br>12:00 | <プレナリー講演><br>『ブレインテック（Brain-Tech）、情報技術の新展開』<br>座長：**辻 真博**（JST研究開発戦略センター）<br>**P-03 川人 光男**（国際電気通信基礎技術研究所）<br>「脳イメージングとAIがつくるデジタルセラピー」<br>**P-04 上野 太郎**（サスメド株式会社）<br>「デジタル技術を用いた持続可能な医療」 | | | |
| | 12:00<br>\|<br>13:30 | | <ランチョンセミナー><br>**LS-04 株式会社ワールドフュージョン**<br>『AI解析データの活用による疾患標的、毒性標的探索への応用』<br>**緑川 淳**（(株)ワールドフュージョン）「BERTによる PubMedの解釈と毒性、疾患標的への活用」<br>**田中 利男**（三重大学院医学系研究科）「LSKBによるゼブラフィッシュの安全性評価」<br>**緑川 淳**（(株)ワールドフュージョン）「タンパク質情報の高次利用とWorkflowによる効率化」 | <ランチョンセミナー><br>**LS-05 パトコア株式会社**<br>『DMTAサイクルを同一プラットフォームで Design Hub』<br>『機械学習・予測ワークフローを効率化！Trainer Engine』 | <ランチョンセミナー><br>**LS-06 シュレーディンガー株式会社**<br>『創薬研究ワークフローのデジタル化を主導する高精度自由エネルギー計算法FEP+の最新情報』 |
| | 13:30<br>\|<br>15:00 | <招待講演><br>『DXで切り拓く医療の未来』<br>座長：**藤家 新一郎**(ペプチスター株式会社)<br>**I-04 辻 真博**（JST研究開発戦略センター）<br>「多様化する創薬モダリティの現状と展望」<br>**I-05 関谷 毅**（大阪大学産業科学研究所）<br>「DX時代の脳波AI解析ツール」<br>**I-06 小林 博幸**（塩野義製薬株式会社）<br>「デジタルセラピューティクスの潮流とシオノギの取り組み」 | <スポンサードセッション><br>**SS-04 富士通株式会社**<br>『富士通が提案する創薬DX ～創薬研究コラボレーションツールの必要性～』<br>「シームレスな研究開発プロセスを実現し創薬研究開発を大きく加速(PKI/Signals Suite)」<br>「研究コラボレーションの促進とDMTA サイクルの効率化で創薬研究開発を大きく加速(Torx)」<br>「低分子創薬向け化合物デザインツールで創薬研究開発を大きく加速(Cresset)」<br>「革新的なペプチド創薬統合型プラットフォームで創薬研究開発を大きく加速」 | <シンポジウム><br>**SP-03 理化学研究所**<br>『新モダリティ探索の新展開と計算による設計手法（FMO法）への期待』<br>モデレーター：**本間 光貴**（理化学研究所）、**福澤 薫**（大阪大学）<br>講師：<br>**藤井 眞一郎**（理化学研究所）「感染症に対するT細胞免疫を賦活するワクチン設計」<br>**池口 満徳**（横浜市立大学）「分子動力学シミュレーションの創薬応用とFMO法への期待」<br>**岩崎 信太郎**（理化学研究所）「翻訳阻害剤の隠れたmRNA配列特異性」 | |
| | 15:00<br>\|<br>15:30 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | | |
| | 15:30<br>\|<br>17:00 | <シンポジウム><br>**S-02 AMED/BINDSインシリコ解析ユニットにおける創薬支援研究**<br>モデレーター：**広川 貴次**（筑波大学）<br>講師：<br>**池口 満徳**（横浜市立大学）<br>「構造生物学データを活用しAIと連携した分子動力学シミュレーション研究」<br>**関嶋 政和**（東京工業大学）<br>「スーパーコンピュータ資源及び大規模シミュレーションとAIに基づく創薬・生命科学の支援」<br>**富井 健太郎**（産業技術総合研究所）<br>「ライフサイエンス研究加速のためのバイオインフォマティクス研究」<br>**本間 光貴**（理化学研究所）<br>「AIとFMO法を融合したインシリコスクリーニングと分子間相互作用解析支援」 | | | <スポンサードセッション><br>**SS-05 OpenEye, Cadence Molecular Sciences**<br>『Structure-Based Lead Optimization in Orion® – Progressively Improving Estimates of Binding Affinity –』 |
| | 17:00<br>\|<br>19:00 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | | |

# 10月26日(水)【2日目】

| 時間 | 瑞雲（2F） | 研修室（4F） | 401 | 407 |
|---|---|---|---|---|
| 10:00<br>\|<br>12:00 | | | | |
| 12:00<br>\|<br>13:30 | | | | |
| 13:30<br>\|<br>15:00 | <口頭発表O5><br>『**創薬応用（2）**』<br>座長：**池上 貴史**（(株)モルシス）、**関嶋 政和**（東京工業大学）<br>**O5-1 Chikashige Yamanaka** (Kyushu Institute of Technology) "De novo generation of drug candidate compounds from disease-specific transcriptome data using deep learning"<br>**O5-2 Kenjiro Tanaka** (Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Nagoya University) "Data-Driven Understanding of TRPA1 Agonist Diversity"<br>**O5-3 Kazuki Yamamoto** (The University of Tokyo) "In Silico and In Vitro Screening for Inhibitors of SARS-CoV-2 Main Protease Avoiding Peptidyl Secondary Amides"<br>**O5-4 David Jimenez Barrero** (Elix, Inc.) "Active Learning via Incremental Revelation: Dipeptidyl Peptidase-4 Inhibitors Case Study"<br>**O5-5 Joshua Owoyemi** (Elix, Inc.) "SmilesFormer: Language Model for Molecular Design"<br>**O5-6 Nazim Medzhidov** (Elix, Inc.) "Hit to Lead Discovery of Benzylpiperidine Acetylcholinesterase Inhibitors Using Generative Models: a Retrospective Case Study" | <フォーカストセッション><br>**FS-02 計算ADMET研究関連研究発表**<br>モデレーター：**湯田 浩太郎**（株式会社インシリコデータ）、**植沢 芳広**（明治薬科大学）<br>講師：<br>**植沢 芳広**（明治薬科大学）「分子画像を用いたQSAR解析：DeepSnap法の開発の現状」<br>**曽根 秀子**（横浜薬科大学）「デジタルトランスフォーメーション時代における「計算毒性学」の現状とこれから」<br>**前田 和哉**（北里大学薬学部）「薬物の体内動態予測に資するin silico予測＆シミュレーション技術の進展」 | <フォーカストセッション><br>**FS-03 医療データAI解析実践フォーラム**<br>モデレーター：**水野 聖士**（東北大学）、**小島 諒介**（京都大学）、**荻島 創一**（東北大学）<br>講師：<br>**小島 諒介**（京都大学）「多様な医療関連データへのグラフニューラルネットワークの応用」<br>**篠原 恵美子**（東京大学）「診療テキストからの表現型の抽出に向けたコーパスアノテーション」<br>**内野 詠一郎**（京都大学）「イベント発生に関わる患者層別化手法の開発」<br>**水野 聖士**（東北大学）「行動変容を目指した疾患予測モデルの構築」 | <フォーカストセッション><br>**FS-04 先端的計測技術**<br>モデレーター：**石田 誠一**（国立衛研/崇城大）、**多田隈 尚史**（上海科技大学 生命学院）、**藤田 聡史**（産総研）<br>講師：<br>**洲崎 悦生**（順天堂大院医）「3次元組織学による臓器・全身の網羅的解析」<br>**中西 秀之**（東京医科歯科大・生体材料工学研）「翻訳を人為的にコントロール可能な“スマートmRNA医薬”の開発」<br>**古江 美保**（株式会社ニコン）「臓器チップを用いて培養された組織の形態評価手法」 |
| 15:00<br>\|<br>15:30 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | | |
| 15:30<br>\|<br>17:00 | <口頭発表O6><br>『**計算化学（分子認識）/構造相関解析/量子構造生命科学**』<br>座長：**岡田 晃孝**（日本たばこ産業(株)）、**高谷 大輔**（大阪大学）、**高橋 一敏**（味の素(株)）<br>**O6-1 Yuma Handa** (Hoshi University) "Understanding RNA sequence specificity of inhibitors of translation initiation factor by dynamical FMO analysis"<br>**O6-2 Hiromu Matsumoto** (Kyushu University) "Development of protein-ligand binding affinity evaluation method by combining classical MD and FMO calculations"<br>**O6-3 Hinata Osawa** (Graduate School of Medicine, Dentistry and Pharmaceutical Sciences, Division of Pharmaceutical Science of Okayama University) "Structure-Activity Relationship Study of PROTACs against Hematopoietic Prostaglandin D2 Synthase"<br>**O6-4 Katsuki Takebe** (Osaka University) "Investigation of hydrogen bond network in the active center of catechol O-methyltransferase by X-ray crystallography and FMO method."<br>**O6-5 Tomoki Yonezawa** (Keio University) "PoSSuMds Update：Addition Of Clinical Candidates And COVID-19 Clinical Trials Information"<br>**O6-6 Yuko Tsuchiya** (AIRC, AIST) "Databases of similar epitopes, PoSSuMAg, and putative ligand-binding pockets on AlphaFold models, PoSSuMAF" | <フォーカストセッション><br>**FS-05 化学データサイエンスや人工知能関連研究発表**<br>モデレーター：**湯田 浩太郎**（株式会社インシリコデータ）、**植沢 芳広**（明治薬科大学）<br>講師：<br>**水野 忠快**（東京大学薬学部）「化合物作用の包括的理解に向けた数値化研究―病理画像の数値化」<br>**小野塚 昭**（塩野義製薬株式会社）「塩野義製薬におけるデータサイエンス部の取り組みとデータ活用基盤」<br>**湯田 浩太郎**（株式会社インシリコデータ）「化学研究の「自動化」時代から、「自律型（オートノマス）」時代への進化と対応」 | <口頭発表O7><br>『**分子ロボティクス/レギュラトリサイエンス**』<br>座長：**川又 生吹**（東北大学）<br>**O7-1 Hiroshi Ogata** (Tohoku University) "Pattern formation in sol media using branched DNA motifs"<br>**O7-2 Mst Rubaya RASHID** (Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University, Japan) "Force measurement of kinesin-propelled microtubules in swarming using electromagnetic tweezers"<br>**O7-3 Chen Ma** (Tokyo Institute of Technology) "Order Parameter Analysis of Microtubule Motility Dynamics"<br>**O7-4 Soichiro Hiroi** (Graduate School of Arts and Science, The University of Tokyo) "Deep Learning Detection of Giant Vesicles Using a Synthetic Data Set of Confocal Fluorescence Microscopy Images"<br>**O7-5 Xiaoran Hu** (Tokyo Institute of Technology) "DNA AFM images in Super-resolution by VR system and Deep Learning"<br>**O7-6 Masanori Niwano** (Sumitomo Chemical Co., Ltd.) "A 3D hydrodynamic ocean model simulation and its data analyses targeting waters off Niihama in Seto Inland Sea, Japan" | <フォーカストセッション><br>**FS-04 先端的計測技術**<br>モデレーター：**石田 誠一**（国立衛研/崇城大）、**多田隈 尚史**（上海科技大学 生命学院）、**藤田 聡史**（産総研）<br>講師：<br>**萩原 将也**（理研）「MPSとオルガノイドを繋ぐ生体模倣システムの構築」<br>**川端 健二**（国立研究開発法人医薬基盤・健康・栄養研究所）「iPS 細胞由来インビトロ血液－脳関門モデルを利用した創薬基盤技術」<br>**鈴木 郁郎**（東北工業大）「ヒトiPS神経のMEA計測法による化合物の毒性リスク予測」 |
| 17:00<br>\|<br>19:00 | ポスター発表（1階 展示ホール） | | | |

# 10月27日(木)【3日目】

| 日付 | 時間 | 大ホール（5F） LIVE配信 | 桃源（2F） | 福寿（2F） | 平安（2F） |
|---|---|---|---|---|---|
| 10月27日(木) | 10:00<br>\|<br>12:00 | <プレナリー講演><br>『新たな創薬モダリティー：基礎から社会実装へ』<br>座長：**小比賀 聡**（大阪大学大学院薬学研究科）<br>**P-05 久保庭 均**（バイオインダストリー協会、中外製薬株式会社）<br>「日本のバイオ戦略と創薬力」<br>**P-06 中村 善隆**（日本新薬株式会社）<br>「核酸医薬を用いた難病・希少疾患治療薬研究開発」 | | | |
| | 12:00<br>\|<br>13:30 | | <ランチョンセミナー><br>**LS-07 アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社**<br>『創薬研究領域で進むAI/機械学習を中心としたクラウド活用のご紹介』<br>**藤川 のぞみ**（アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社）「創薬研究領域でのAI/機械学習活用のためのMLOps」<br>**中山 洋平**（アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社）「AWSにおけるAI創薬に関する取り組み：GNNに関する研究とOSSのご紹介」<br>**原田 裕平、森下 裕介、岡田 渚**（アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社）「今日から手軽に始める創薬プロセスのクラウド化」 | <ランチョンセミナー><br>**LS-08 エルゼビア・ジャパン株式会社**<br>『Elsevier R&D Solutionsのご紹介』<br>**出羽 俊和**（エルゼビア・ジャパン株式会社）<br>社内外の化学データを一括管理し活用するための事例として、電子実験ノートに登録された反応情報をReaxysで参照するReaxys Contents Integrationについてのご紹介します。 また日本で初めての導入事例として、日本新薬株式会社探索研究部の遠藤優様より導入プロジェクトの概要についてご講演いただきます。 | <ランチョンセミナー><br>**LS-09 CBI学会**<br>『AMEDの事業紹介』<br>**塩塚 政孝**（AMED）<br>「橋渡し研究プログラム 異分野融合型研究開発推進支援事業のご紹介」<br>**松宮 志麻**（AMED）<br>「医療・介護・健康データ利活用基盤高度化事業のご紹介」<br>**友安 弓子**（AMED）<br>「医療機器の研究開発及び事業化等の支援についてのご紹介」<br>『 CBI学会総会（CBI学会の今後の取り組みについて）』<br>**大川 和史**（旭化成ファーマ）「創薬研究会の取り組み方針」<br>**今枝 泰宏**（Epigeneron）、**茂櫛 薫**（cBioinformatic）「創薬ベンチャー連携の取り組み方針」<br>**池田 和由**（慶應義塾大学/理化学研究所）<br>「若手の会取り組み方針」 |
| | 13:30<br>\|<br>15:00 | <パネルディスカッション><br>『新しい医薬品の概念が変える医療』<br>モデレーター：**坂田 恒昭**（大阪大学共創機構）<br>**辻 真博**（JST研究開発戦略センター）<br>**萩原 義久**（産業技術総合研究所）<br>**小比賀 聡**（大阪大学大学院薬学研究科）<br>**藤家 新一郎**（ペプチスター株式会社）<br>**小林 博幸**（塩野義製薬株式会社）<br>**福澤 薫**（大阪大学大学院薬学研究科） | | | |
| | 15:00<br>\|<br>16:30 | <口頭発表賞・ポスター賞授賞式><br><若手奨励賞授賞式><br><若手奨励賞受賞記念講演><br>**Y-01 江崎 剛史**（滋賀大学データサイエンス・AIイノベーション研究推進センター）<br>「AI創薬の支援を目指したADMEデータのキュレーションと予測モデル構築」 | | | |
| | 16:30<br>\|<br>17:00 | 次年度大会の紹介<br>クロージング | | | |

# 10月27日(木)【3日目】

| 時間 | 瑞雲（2F） | 研修室（4F） | 401 |
|---|---|---|---|
| 10:00<br>\|<br>12:00 | | | |
| 12:00<br>\|<br>13:30 | | | |
| 13:30<br>\|<br>15:00 | <口頭発表O8><br>**『創薬応用 (3)/分子ロボティクス』**<br>座長：**本間 光貴**（理化学研究所）、 **川又 生吹**（東北大学）<br>**O8-1 Shunji Suetaka** (The University of Tokyo) "Computational and experimental studies of hot spots in the c-Myb–KIX interaction"<br>**O8-2 Kyosuke Tsumura** (FUJIFILM Corporation) "Upgrade of AI-AAM and its application to lead-to-lead and peptide downsizing scaffold hopping"<br>**O8-3 Ryuichiro Ishitani** (Preferred Networks, Inc.) "Molecular design method using a reversible tree representation of chemical compounds and deep reinforcement learning"<br>**O8-4 Hirotaka Kondo** (Kansai University) "Improvement of a Prototype VR AFM Manipulation System Emulated by a Dispensing Machine"<br>**O8-5 Ken Komiya** (Japan Agency for Marine-Earth Science & Technology (JAMSTEC)) "Experimental Investigation of Extended Nucleic Acid Generation Circuits for DNA-based Signal Transduction" | <フォーカストセッション><br>**FS-06 CBI若手研究者、僕たちのRX ～新しいキャリア、新しいコラボレーションのかたち～**<br>モデレーター：<br>**渡邉 怜子**（大阪大学）<br>**渡邉 博文**（(株)ウィズメーティス）<br>**高橋 一敏**（味の素(株)）<br>講師：<br>**江崎 剛史**（滋賀大学）「インシリコ創薬を加速するデータとモデルの扱い方」<br>**清水 祐吾**（慶應義塾大学）「公共データを用いたAIモデルの中分子創薬への応用」<br>**叢雲 くすり**（化合物空間）「よろしい、ならば創薬だ――人類総創薬プレイヤー時代へ」<br>企画：CBI若手の会有志（https://wakate.cbi-society.info/wakate/）：熊澤啓子（帝人ファーマ（株））、増田友秀（東レ(株)）、加藤幸一郎（九州大学）、池田和由（理化学研究所/慶應大学） | <フォーカストセッション><br>**FS-07 オミックスの原理研究会**<br>モデレーター：<br>**美宅 成樹**（名古屋大学名誉教授）<br>**広川 貴次**（筑波大学医学医療系）<br>**荻島 創一**（東北大学東北メディカル・メガバンク機構）<br>講師：<br>**富井 健太郎**（産業技術総合研究所）「AlphaFoldの概要と構造モデルの利用」<br>**美宅 成樹**（名古屋大学名誉教授）、**澤田 隆介**（岡山大学）「ゲノム配列からの『生命の相図』による生物種の定義」<br>**美宅 成樹**（名古屋大学名誉教授）、**澤田 隆介**（岡山大学）「『生命の相図』からみたSARS-CoV-2の解析」 |
| 15:00<br>\|<br>16:30 | | | |
| 16:30<br>\|<br>17:00 | | | |

# 目　次
## Contents

CBI 学会 会長挨拶 ..... 1

CBI 学会 2022 年大会 大会長挨拶 ..... 2

CBI 学会 2022 年大会 実行委員長挨拶 ..... 3

協賛団体 ..... 4

大会スポンサー ..... 5

大会組織委員会 ..... 8

会場案内図 ..... 12

展示ブース配置図 ..... 14

企業広告 ..... 15

企業ロゴ ..... 20

CBI 学会 2023 年大会　開催のご案内 ..... 21

# CBI 学会 会長挨拶

## －CBI 学会 2022 年大会の開催に向けて－

CBI 学会 2022 年大会は、10 月 25 日（火）から 27 日（木）までの 3 日間、坂田恒昭大会長、福澤薫実行委員長のもと、『新しい医薬品の概念が変える医療～次世代モダリティ、デジタルセラピー～』というテーマで開催されます。このような魅力的なテーマを企画いただいた坂田大会長、また、本テーマが目指すところを実現し、大会を活性化するために、工夫を凝らしたプログラムをご準備いただいた福澤実行委員長に心より御礼申し上げます。

2020 年の初めから現在に至るまで続くコロナパンデミックの時代は、まさに先の読めない、不確実で、正解の無い時代ですが、我々はそんな時代だからこそ、前向きに、力強く変革を推し進めていかなければならないということを痛感いたします。多くの産業領域でデジタルトランスフォーメーションが一気に加速する中、創薬研究開発の領域におきましても、基礎～臨床の全てのステージで、デジタル化の検討に留まらず、新たな医薬品の概念（モダリティ）、新たな技術プラットフォームの検討が同時並行で急激に進む「創薬トランスフォーメーション」の時代を迎えています。特に AI（Artificial Intelligence、人工知能）、ビッグデータ、ロボットによる自動化の創薬への活用が進む中、計算科学が担う役割、そして計算科学を核として発展してきた CBI 学会の果たす役割はますます大きくなっています。

そのような中、開催される本大会では、情報科学、計算化学、創薬化学、生物学、医療等、多様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、新たな医療・医薬品のあるべき姿について議論いただきます。医薬品のモダリティは低分子医薬品、抗体医薬品、核酸医薬品やデジタル治療等へと大きく拡張してきていますが、現在進行中の研究開発の流れに深掘りするのに留まらず、その先を見据えたさらに新しいモダリティを探求しようという野心的な取り組みになっています。また、新たなモダリティの開発には、ビッグデータ AI 活用が欠かせなくなってきていますので、これらの領域の展開についても同時に議論して参ります。本大会を、世界をリードする新しい医薬品の概念について考える機会にしていただけると思います。

昨年及び一昨年度の CBI 学会大会は、コロナウィルスの感染拡大の中、オンラインのみでの開催となりましたが、2022 年大会は、安全面に配慮しながら船堀タワーホールにて開催できることとなりました。また、遠隔地から参加される方のために、メイン会場のイベントにつきましてはライブストリーム配信を予定しております。製薬企業、IT ソリューションプロバイダー企業、アカデミア、創薬/AI ベンチャー企業に所属されるみなさまには、ぜひとも本大会に参加いただき、専門領域、世代を超えた新たな交流、連携を生み出す機会としていただきたいと思います。みなさまと直接お会いできることを心から楽しみにしております。

最後に、本大会に参加される全てのみなさまにとって、実り多き 3 日間となることを祈念いたしまして、ご挨拶とさせていただきます。

CBI 学会 会長
相良 武（大鵬薬品工業株式会社）

# CBI 学会 2022 年大会 大会長挨拶

## 新しい医薬品の概念が変える医療<br>～次世代モダリティ・デジタルセラピー～<br>開催にあたって

CBI 学会 2022 年大会にご参加頂き誠にありがとうございます。今年は久方ぶりにオンサイトとのハイブリッド開催ができ、皆様の交流がより深まることと期待しております。

さて、薬を創ることの目的はと申しますと言うまでもなく病気で苦しんでおられる患者様をその苦しみから解放するお手伝いをすることにあります。それには病気のメカニズムを解明する生理学的な基礎医学研究を推進することはもちろんのことですが、どのような医薬品の概念（モダリティ）が最適であるのかを検討する技術的側面も大切なことです。もちろん技術ありきの話ではありません。

今回の COVID-19 では、従来から言われておりました被引用論文数などからみるわが国の基礎研究力の低下だけでなく、新しい概念の医薬品を基礎研究からさらに引き上げて社会実装するバリューチェインの整備欠如が一層鮮明になりました。COVID-19 の感染拡大という有事に素早く有用な治療法提供するということに対応できませんでした。また医薬品が戦略物資であることも再認識させられました。

とはいうもののわが国でも大手製薬企業である中外製薬様、第一三共株式会社様などの抗体エンジニアリング技術および日本新薬株式会社様の核酸技術は世界から注目されており、この技術が実を結びファリシマブ、エンハーツおよびビルテプソなどとして患者様のお手元に届いております。

一方でアカデミア発の新しい医薬品の概念をいち早く社会実装するためには、産学連携はもとより、スタートアップの設立、発展のための環境整備がわが国では求められております。岸田首相も 2022 年はスタートアップ創出元年とおっしゃっておられます。

医薬品を世に出すためには多くのプロセスが必要です。研究だけではなくてこれを支える製造・開発・薬事などのノウハウ確立のための研究開発および産学官での議論も必要となってきます。

デジタルセラピーに目を向ければ株式会社 CureApp 様の高血圧治療補助アプリ CureAppHT など行動変容アプリが承認され、さらにデジタルセラピーは治療用アプリの開発へと向かっております。

本大会を通じて従来から言われていた一対一のサイロ型オープンイノベーションだけではなくて、産学官での役割を十分認識して、多対多のネットワーク型オープンイノベーションの推進に向けての交流及び実践が進むことを願っております。これは研究から社会実装へまた社会実証から再び研究へとエコシステムを回すことにも有益だと思っております。

CBI 学会 2022 年大会 大会長
坂田 恒昭（大阪大学共創機構）

# CBI 学会 2022 年大会 実行委員長挨拶

CBI 学会 2022 年大会では、コロナ禍による２度のオンライン開催を経て、３年ぶりの現地開催が実現いたしました。開催に向けてご尽力いただきました、大会長、プログラム委員長を始め実行委員会、企画委員会、プログラム委員会、事務局および関係者の皆様方に心より御礼申し上げます。

本大会は、「新しい医薬品の概念が変える医療～次世代モダリティ、デジタルセラピー～」をテーマに掲げています。核酸医薬品や抗体などの新規モダリティ、またコロナ禍でさらに進化しているデジタル、AI、DX といった用語は、私の属する分子シミュレーション分野でも毎日耳にするほど浸透してきており、これらを取り入れなければ時代の波に取り残されてしまう危機感すら感じております。大会では、益々多様化する医療・創薬が CBI の名称である Chemistry（化学）、Biology（生物学）、Informatics（情報学）を駆使して進化している現状を共有し、将来に向けた活発な議論の場になってほしいと考えています。

CBI 学会は、業界の常識にとらわれずに自由に交流できる、また異分野をまたぐ包容力のあるところが大変素晴らしいと感じております。私自身、2000 年に当時国立医薬品食品衛生研究所におられた神沼二眞先生に導かれて以来、20 年以上に渡って CBI 学会にお世話になって参りました。常に時代の潮流に乗った本学会を通じで多くの出会いや機会を頂き、それらが糧となって現在の自分を作っていると言っても過言ではありません。少しでも恩返しできたらという思いで大会運営をまとめて参りました。

おかげ様で 600 名近くの皆様が参加されると聞いております。今回は現地開催ではありますが、コロナ禍で我々が体験したオンラインの良さも活かし、プレナリー講演・招待講演・シンポジウムを開催する大ホールからのライブストリーミング配信を含むハイブリッド型の開催といたしました。また、ポスター発表においても、昨年度好評であった動画の視聴や要旨の閲覧ができるようになっており、現地に足を運ぶことができない参加者の皆様にもお楽しみいただける内容になっております。また大会運営の方もオンライン化によって確実に進化を遂げまして、全国の実行委員メンバーと月１回の実行委員会を開催し、細やかに連携できる体制を整え、随所に「大会を盛り上げる工夫」が凝らされています。

本大会を介して、多くの新たな交流が生まれること、また参加者の皆様には、学会の空気を感じ、大いに学び、議論し、実りある３日間になりますことを祈念いたします。

CBI 学会 2022 年大会 実行委員長
福澤　薫（大阪大学大学院薬学研究科）

# 協賛団体

Academic Association

| ＜協賛＞ | <Cooperated by> |
| --- | --- |
| 日本応用数理学会 | The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics (JSIAM) |
| 日本分子生物学会 | The Molecular Biology Society of Japan (MBSJ) |
| 日本生物物理学会 | The Biophysical Society of Japan (BSJ) |
| 日本バイオインフォマティクス学会 | Japanese Society for Bioinformatics (JSBi) |
| 情報処理学会 | Information Processing Society of Japan (IPSJ) |

| ＜後援＞ | |
| --- | --- |
| バイオコミュニティ関西 | Biocommunity Kansai（BiocK） |

# 大会スポンサー
Sponsors

| ＜展示ブース＞ | < Exhibition Booth > |
|---|---|
| iSiP 株式会社 | iSiP, Inc. |
| アトリビュート株式会社 | ATTRIBUTE CO., LTD. |
| アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社 | Amazon Web Services Japan G.K. |
| 茨城県中性子ビームライン | IBARAKI Neutron Beamline |
| インフォコム株式会社 | INFOCOM CORPORATION |
| SCSK 株式会社 | SCSK Corporation |
| 株式会社 Elix | Elix, Inc. |
| エルゼビア・ジャパン株式会社 | Elsevier Japan K.K. |
| OpenEye, Cadence Molecular Sciences | OpenEye, Cadence Molecular Sciences |
| クオンティニュアム株式会社 | Quantinuum K.K. |
| 株式会社計算科学 | Computational Science, K.K |
| 神戸天然物化学株式会社 | KNC Laboratories Co., Ltd. |
| コンフレックス株式会社 | CONFLEX Corporation |
| ジーデップ・アドバンス/エヌビディア合同会社 | GDEP / NVIDIA |
| シュレーディンガー株式会社 | Schrödinger K.K. |
| ドットマティクス株式会社 | Dotmatics |
| 富士通株式会社 | Fujitsu Limited |
| 富士フイルム和光純薬株式会社 | FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation |
| ブルカージャパン株式会社 | Bruker Japan K.K. |
| 株式会社分子ロボット総合研究所 | Molecular Robotics Research Institute, Co., Ltd. |
| ダッソー・システムズ株式会社 | Dassault Systèmes K.K. |
| 株式会社モルシス | MOLSIS Inc. |
| ライフマティックス株式会社 | Lifematics Inc. |
| Repertoire Genesis 株式会社 | Repertoire Genesis Inc. |
| 株式会社ワールドフュージョン | World Fusion Co., Ltd. |

| ＜書店／出版社ブース＞ | < Bookstore / Publisher > |
|---|---|
| 株式会社エヌ・ティー・エス | NTS |

| ＜シンポジウム(S)＞ | < Symposium > |
|---|---|
| AMED/BINDS インシリコ解析ユニットにおける創薬支援研究 | Research activities for supporting drug discovery by *in-silico* unit of BINDS (AMED) |
| CBI 研究機構 量子構造生命科学研究所 | CBI Research Institute Quantum-Structural Life Science Labolatories |

| ＜ランチョンセミナー(LS)＞ | < Luncheon Seminar > |
|---|---|
| アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社 | Amazon Web Services Japan G.K. |
| 株式会社 Elix | Elix, Inc. |
| エルゼビア・ジャパン株式会社 | Elsevier Japan K.K. |
| CBI 学会 | Chem-Bio Informatics Society(CBI) |
| シュレーディンガー株式会社 | Schrödinger K.K. |
| ドットマティクス株式会社 | Dotmatics |
| パトコア株式会社 | Patcore, Inc. |
| 株式会社モルシス | MOLSIS Inc. |
| 株式会社ワールドフュージョン | World Fusion Co., Ltd. |

| ＜スポンサードセッション(SS)＞ | < Sponsored Session > |
|---|---|
| アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社 | Amazon Web Services Japan G.K. |
| エヌビディア合同会社 | NVIDIA |
| OpenEye, Cadence Molecular Sciences | OpenEye, Cadence Molecular Sciences |
| クオンティニュアム株式会社 | Quantinuum K.K. |
| 富士通株式会社 | Fujitsu Limited |

| ＜スポンサードシンポジウム(SP)＞ | |
|---|---|
| MPS（生体模倣システム）の今後の展開を考える -AMED-MPS2、MPS-RS プロジェクト開始にあたって- | Future development of Microphysiological Systems (MPS) -Kicking off the AMED-MPS2 & MPS-RS projects- |
| 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 (AMED) |
| 理化学研究所 | RIKEN |

| ＜大会企画セッション(OS)＞ | < Organized Session > |
| --- | --- |
| 新規医療モダリティとしてのデジタルセラピーの最前線 | Frontiers of Digital Therapy as a Novel Modality in Medicine |

| ＜広告掲載＞ | < Advertisement > |
| --- | --- |
| ケモインフォ株式会社 | ChemoInfo Co., Ltd. |
| ジーデップ・アドバンス/エヌビディア合同会社 | GDEP / NVIDIA |
| ジュビラントバイオシスリミテッド | Jubilant Biosys Limited |
| 三井情報株式会社 | MITSUI KNOWLEDGE INDUSTRY CO., LTD. |

# 大会組織委員会
CBI2022 Committee Members

## ＜CBI 学会 2022 年大会大会長＞　Conference Chairperson

坂田 恒昭　（大阪大学共創機構）
Tsuneaki Sakata　(Osaka University)

## ＜大会実行委員会＞　Organizing Committee

実行委員長　Chairperson

福澤　薫　　（大阪大学大学院薬学研究科）
Kaori Fukuzawa　(Osaka University)

池田 和由　　（理化学研究所／慶應義塾大学）
Kazuyoshi Ikeda　(RIKEN/Keio University)

石川 岳志　　（鹿児島大学）
Takeshi Ishikawa　(Kagoshima University)

石田 誠一　　（崇城大学）
Seiichi Ishida　(Sojo University)

江崎 剛史　　（滋賀大学）
Tsuyoshi Esaki　(Shiga University)

岡田 晃季　　（日本たばこ産業株式会社）
Akitoshi Okada　(Japan Tobacco Inc.)

岡部 隆義　　（東京大学創薬機構）
Takayoshi Okabe　(Drug Discovery Initiative, The University of Tokyo)

荻島 創一　　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構）
Soichi Ogishima　(Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University)

片倉 晋一　　（慶應義塾大学）
Shinichi Katakura　(Keio University)

加藤 幸一郎　（九州大学）
Koichiro Kato　(Kyushu University)

小長谷 明彦　（恵泉女学園大学／東京工業大学名誉教授）
Akihiko Konagaya　(Keisen University/Tokyo Institute of Technology)

相良　武　　（大鵬薬品工業株式会社）
Takeshi Sagara　(TAIHO PHARMACEUTICAL CO., LTD.)

清水 祐吾　　（慶應義塾大学）
Yugo Shimizu　(Keio University)

関嶋 政和　　（東京工業大学情報理工学院）
Masakazu Sekijima　(Tokyo Institute of Technology)

高橋 一敏　　（味の素株式会社）
Kazutoshi Takahashi　(Ajinomoto Co., Inc.)

高谷 大輔　　（大阪大学大学院薬学研究科）
Daisuke Takaya　(Osaka University)

永家　聖　　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構）
Satoshi Nagaie　(Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University)

夏目 やよい（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）
Yayoi Natsume　(National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition)

茂櫛　薫　　（シーバイオインフォマティックス株式会社）
Kaoru Mogushi　(cBioinformatics Inc.)

## ＜大会企画委員会＞　Planning Committee

小比賀 聡　（大阪大学大学院薬学研究科）
Satoshi Obika （Osaka University）

小林 博幸　（塩野義製薬株式会社）
Hiroyuki Kobayashi （Shionogi Co., Ltd.）

辻　真博　（科学技術振興機構）
Masahiro Tsuji （Japan Science and Technology Agency）

萩原 義久　（産業技術総合研究所）
Yoshihisa Hagihara （National Institute of Advanced Industrial Science and Technology）

藤家 新一郎（ペプチスター株式会社）
Shinichiro Fujiie （PeptiStar Inc.）

## ＜プログラム委員会＞　Program Committee

委員長　Chairperson

荻島 創一　（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構）
Soichi Ogishima （Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University）

副委員長　Vice-Chairperson

池田 和由　（理化学研究所／慶應義塾大学）
Kazuyoshi Ikeda （RIKEN/Keio University）

池上 貴史　（株式会社モルシス）
Takashi Ikegami （MOLSIS Inc.）

石川 岳志　（鹿児島大学）
Takeshi Ishikawa （Kagoshima University）

石田 誠一　（崇城大学）
Seiichi Ishida （Sojo University）

植沢 芳広　（明治薬科大学）
Yoshihiro Uesawa （Meiji Pharmaceutical University）

江崎 剛史　（滋賀大学）
Tsuyoshi Esaki （Shiga University）

岡田 晃季　（日本たばこ産業株式会社）
Akitoshi Okada （Japan Tobacco Inc.）

片倉 晋一　（慶應義塾大学）
Shinichi Katakura （Keio University）

加藤 幸一郎（九州大学）
Koichiro Kato （Kyushu University）

上村 みどり（CBI 研究機構）
Midori Kamimura （CBI research Institute）

河合 隆利　（慶應義塾大学）
Takatoshi Kawai （Keio University）

川又 生吹　（東北大学）
Ibuki Kawamata （Tohoku University）

北　寛士　（株式会社カネカ）
Hiroshi Kita （KANEKA CORPORATION）

木下 誉富　（大阪公立大学）
Takayoshi Kinoshita （Osaka Metropolitan University）

熊澤 啓子　（帝人ファーマ株式会社）
Keiko Kumazawa （Teijin Pharma Limited）

小島 真一　（田辺三菱製薬株式会社）
Shinichi Kojima （Mitsubishi Tanabe Pharma Corporation）

小長谷 明彦（恵泉女学園大学／東京工業大学名誉教授）
Akihiko Konagaya （Keisen University/Tokyo Institute of Technology）

小宮 健　（国立研究開発法人 海洋研究開発機構）
Ken Komiya （JAMSTEC）

佐藤 朋広　（理化学研究所）
Tomohiro Sato （RIKEN）

佐藤 佑介　（九州工業大学）
Yusuke Sato （Kyushu Institute of Technology）

清水 祐吾　（慶應義塾大学）
Yugo Shimizu （Keio University）

関嶋 政和　（東京工業大学）
Masakazu Sekijima （Tokyo Institute of Technology）

髙岡 雄司　（ダッソー・システムズ株式会社）
Yuji Takaoka （Dassault Systemes K.K.）

高橋 一敏　（味の素株式会社）
Kazutoshi Takahashi （Ajinomoto Co., Inc.）

高谷 大輔　（大阪大学大学院薬学研究科）
Daisuke Takaya （Osaka University）

瀧本 征佑　（日本たばこ産業株式会社）
Seisuke Takimoto （Japan Tobacco Inc.）

多田 幸雄　（CBI 研究機構）
Yukio Tada （CBI research Institute）

多田隈 尚史（上海科技大学/東京大学）
Hisashi Tadakuma （ShanghaiTech University/The University of Tokyo）

田中 成典　（神戸大学）
Shigenori Tanaka （Kobe University）

出水 庸介　（国立医薬品食品衛生研究所）
Yosuke Demizu （NIHS）

永堀 博久　（住友化学株式会社）
Hirohisa Nagahori （SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED）

中村 光浩　（岐阜薬科大学）
Mitsuhiro Nakamura （Gifu Pharmaceutical University）

夏目 やよい（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）
Yayoi Natsume （National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition）

野村　渉　（広島大学大学院医系科学研究科）
Wataru Nomura （Hiroshima University）

広川 貴次　（筑波大学）
Takatsugu Hirokawa （University of Tsukuba）

福澤　薫　（大阪大学大学院薬学研究科）
Kaori Fukuzawa （Osaka University）

本間 光貴　（理化学研究所 生命機能科学研究センター）
Teruki Honma （RIKEN）

升岡 優太　（大鵬薬品工業株式会社）
Yuta Masuoka （TAIHO PHARMACEUTICAL CO., LTD.）

増田 友秀　（東レ株式会社）
Tomohide Masuda （TORAY INDUSTRIES INC）

水口 賢司　（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）
Kenji Mizuguchi （National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition）

水間　俊　（帝京平成大学）
Takashi Mizuma （Teikyo Heisei University）

美宅 成樹　（名古屋大学名誉教授）
Shigeki Mitaku （Emeritus Professor, Nagoya University）

茂櫛　薫　（シーバイオインフォマティックス株式会社）
Kaoru Mogushi （cBioinformatics Inc.）

山岸 賢司　（日本大学）
Kenji Yamagishi （Nihon University）

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）
Kazuki Yamamoto （SHaLX Inc./Isotope Science Center, The University of Tokyo）

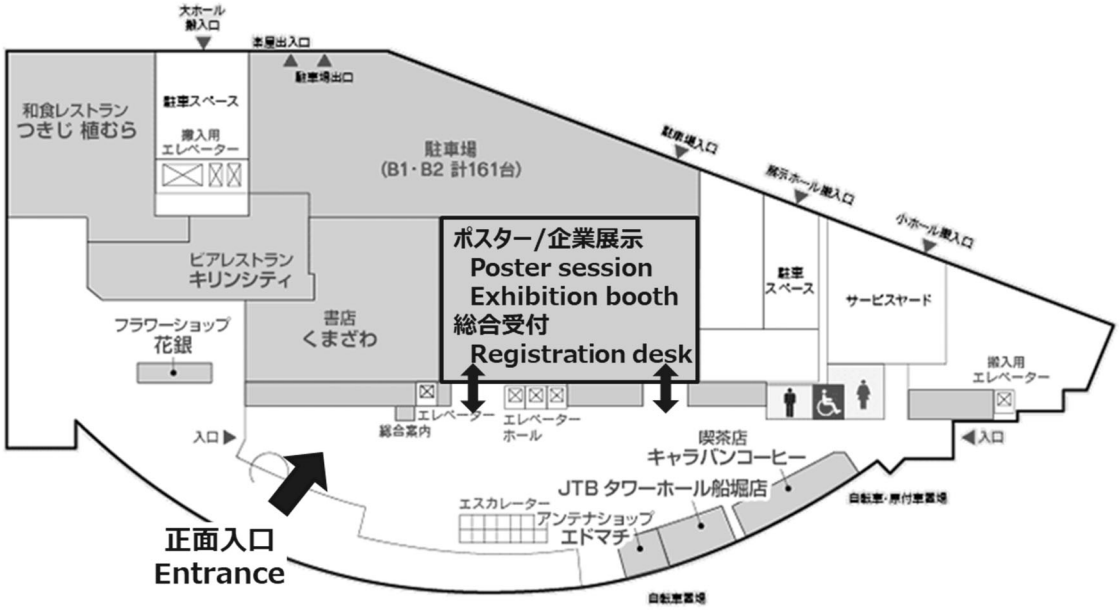
湯田 浩太郎（株式会社インシリコデータ）
Kotaro Yuta （In Silico Data, Ltd. ）

渡邉 博文　（株式会社ウィズメーティス）
Hirofumi Watanabe （WithMetis Co., Ltd. ）

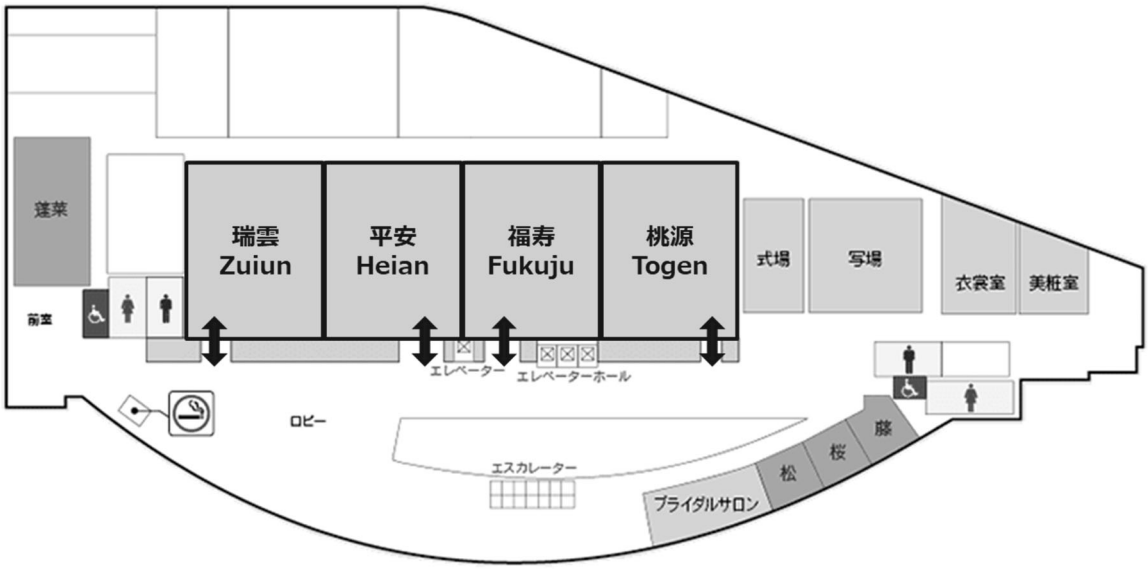
渡邉 怜子　（大阪大学 蛋白質研究所）
Reiko Watanabe （Institute for Protein Research, Osaka University）

# 会場案内図
Venue

1階： 企業展示／ポスター会場／総合受付　（展示ホール）

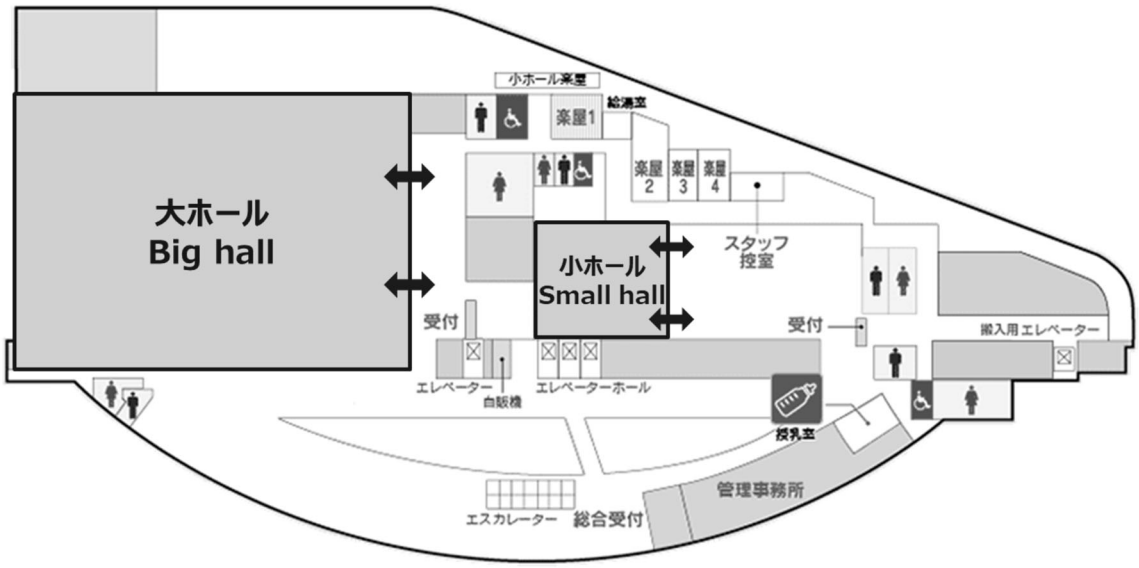



2階：ランチョンセミナー／スポンサードセッション／シンポジウム／
大会企画セッション／口頭発表
（桃源・福寿・平安・瑞雲）



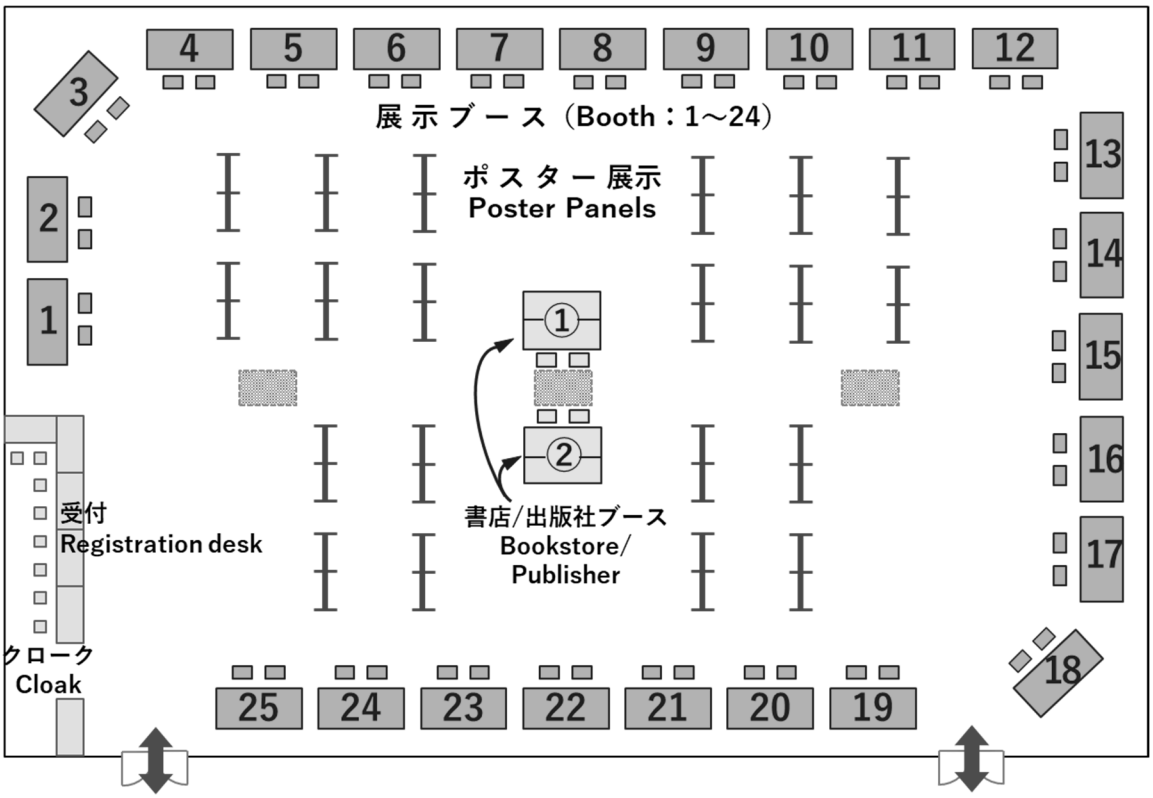
４階：チュートリアル／フォーカストセッション／口頭発表
（研修室・401・402・403・407）

5 階メイン会場： 大会長講演／プレナリー講演／招待講演／シンポジウム／
パネルディスカッション／記念講演
（大ホール、小ホール）



# 展示ブース配置図

Booth Layout



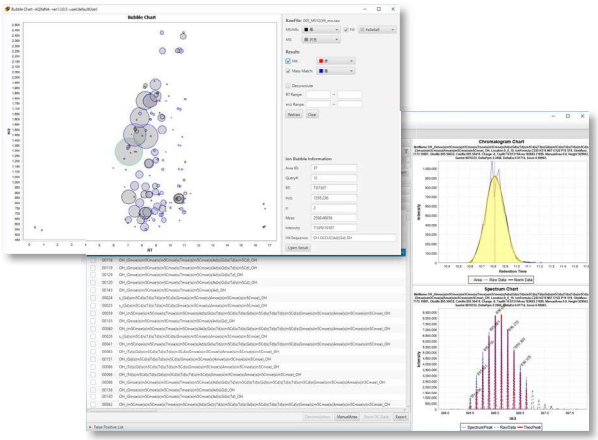

| | |
|---|---|
| 1 | アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社 |
| 2 | 株式会社ワールドフュージョン |
| 3 | 株式会社モルシス |
| 4 | ドットマティクス株式会社 |
| 5 | アトリビュート株式会社 |
| 6 | 茨城県中性子ビームライン |
| 7 | OpenEye, Cadence Molecular Sciences |
| 8 | ブルカージャパン株式会社 |
| 9 | 富士フイルム和光純薬株式会社 |
| 10 | Repertoire Genesis 株式会社 |
| 11 | ライフマティックス株式会社 |
| 12 | 株式会社分子ロボット総合研究所 |
| 13 | 株式会社計算科学 |
| 14 | 富士通株式会社 |
| 15 | ジーデップ・アドバンス / エヌビディア合同会社 |
| 16 | 株式会社 Elix |
| 17 | iSiP 株式会社 |
| 18 | クオンティニュアム株式会社 |
| 19 | シュレーディンガー株式会社 |
| 20 | SCSK 株式会社 |
| 21 | 神戸天然物化学株式会社 |
| 22 | ダッソー・システムズ株式会社 |
| 23 | エルゼビア・ジャパン株式会社 |
| 24 | コンフレックス株式会社 |
| 25 | インフォコム株式会社 |

# 企業広告

| |
|---|
| 三井情報株式会社 |
| ジーデップ・アドバンス/エヌビディア合同会社 |
| ジュビラントバイオシスリミテッド |
| ケモインフォ株式会社 |

# AQXeNA 核酸解析プラットフォーム

## 質量分析データから核酸関連物質を正確かつ効率的に分析

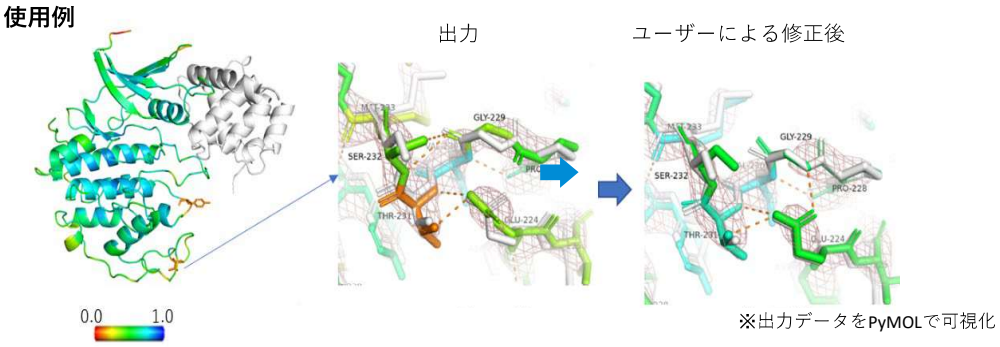


- 類を見ない柔軟かつ簡便な**核酸構造データベース**
- 核酸関連物質のピークを**自動で同定・定量**
- 核酸フラグメントイオン同定アルゴリズム「**Ariadne**※」を搭載
- ヌクレアーゼ処理した**数千塩基の長鎖配列**も解析可能
- **各社分析ベンダー**のフォーマットに対応

※H. Nakayama *et al.*,*Nucleic Acids Res.* 2009 Apr;37(6)

# QAEmap タンパク質立体構造評価システム

## 低分解能のタンパク質結晶構造データをアミノ酸単位で評価するAIシステム

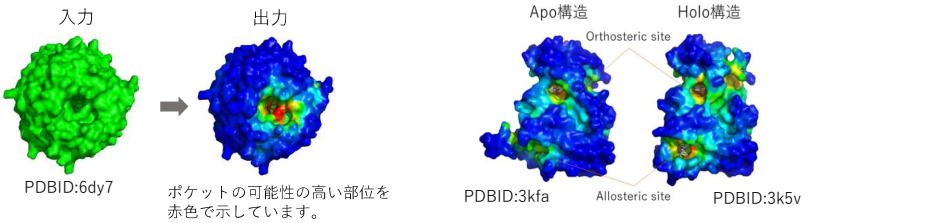



※出力データをPyMOLで可視化

- **深層学習**によりモデル構造と推定高解像度マップとの一致度を予測
- 予測値に基づいてユーザー側で**不正確な構造の検出や修正**が可能
- 低解像度マップにおける**リガンド結合有無の判定**にも利用可能

# DeepSeeker タンパク質リガンド結合領域予測システム

## タンパク質の立体構造データを入力し、低分子化合物が結合可能な領域を予測するAIシステム




※出力データをPyMOLで可視化

- リガンドが結合可能なポケットを**AIを用いて予測**
- 予測したいタンパク質に合った**独自の学習モデル**を作成可能
- ペプチド等の中分子が結合するポケットに対する低分子化合物の結合可能性を評価
- MDのスナップショット構造への評価に使用し、**バーチャルスクリーニング**に用いる構造の選出にも利用可能


三井情報株式会社
DX・バイオ・ヘルスケア営業部
bio-contact-dg@mki.co.jp
https://www.mki.co.jp/solution/bio.html

短納期モデルをご用意しております。

# 短納期モデル
## ラインナップ

NVIDIA エリートパートナーであるジーデップ・アドバンスが、選りすぐりで人気機種の「短納期モデル」をご用意しました。
全モデルで各種フレームワークを整合性と動作確認がとれた状態でプレインストールしてあります。
コアパーツであるNVIDIA RTX A6000やNVIDIA A100のGPUは複数枚搭載可能で、AI用のNVIDIAソフトウェアスタッグやジョブスケジューラーをパッケージ化し「G-works3.0」として高速ストレージにプレインストールしました。
安心して導入いただける深層学習（deeplearning）研究のスピードアッププラットフォームとなります。

## 短納期モデル おすすめ製品

### DeepLearning BOX II

CPUにCore Xシリーズ「Cascade Lake」を搭載した日本初のGPUディープラーニングワークステーション「DeepLearning BOX®」の進化版です。

RTX G-WORKS intel core

●CPU：CPU：Core i9 Core-X 選択可能 ●GPU：NVIDIA RTX A6000 48GB GDDR6 CUDAコア 10752 / Tensorコア 336 / RTコア 84 変更可能&GPUにより最大3枚まで増設可能 ●メモリー：128GB（32GBx4）DDR4-3200 ●ストレージ：SSD 960GB ●OS：なし Ubuntu 20.04 LTS

### GWS-TRP/4G

AMD Ryzen™ Threadripper™ PROプロセッサーを搭載したプロフェッショナル・ワークステーション。1ソケットで最大64コア/128スレッドを実現し、優れたパフォーマンスと電力効率を両立し、GPUは最大で4枚まで搭載可能です。

RTX G-WORKS RYZEN THREADRIPPER

●CPU：AMD Ryzen Threadripper PRO ●GPU：NVIDIA RTX A6000 48GB GDDR6 CUDAコア 10752 / Tensorコア 336 / RTコア 84 変更可能&GPUにより最大4枚まで増設可能 ●メモリー：128GB（16GBx8）ECC Registered DDR4-3200 ●ストレージ：SATA SSD 960GB NVMe M.2 22x80mm <1DWPD ●OS：Ubuntu 20.04 LTS もしくは Windows10 Pro for Workstation 64bit 選択可能

### GWS-621A

第3世代「Xeon® Scalable processor」を2基搭載したミニタワーワークステーション。コンパクトな筐体に加えて7スロットのGen4 PCI-ExpressX16バスを装備しハイエンドグラフィックカードも搭載可能です。

RTX G-WORKS intel XEON

●CPU：Dual Xeon SILVER 4310 Ice Lake-SP 12C/24T 2.1GHz/3.3GHz L3=18MB TDP120W DDR4-2667 ●GPU：NVIDIA RTX A4000 16GB GDDR6 CUDAコア6144 / Tensorコア 192 / RTコア 48変更可能&GPUにより最大2枚まで増設可能 ●メモリー：128GB（32GBx4）DDR4-3200 ECC Registerd ●ストレージ：SSD 960GB ●OS：なし Ubuntu 20.04 LTS もしくは Windows10 Pro for Workstation 64bit 選択可能

### GSV-SMC4U4G

第3世代「Xeon® Scalable processor（Ice Lake-SP）」は前世代のCascade Lakeから1.5〜8倍の性能が向上。GPUは最大で4枚まで搭載可能で、OSはUbuntu20.04を搭載し、Deeplearing開発環境もインストール済みです。

RTX G-WORKS intel XEON

●CPU：Dual Xeon SILVER 4310 Ice Lake-SP 12C/24T 2.1GHz/3.3GHz L3=18MB TDP120W DDR4-2667 ●GPU：NVIDIA RTX A6000 48GB GDDR6 CUDAコア 10752 / Tensorコア 336 / RTコア 84 変更可能&最大4枚まで増設可能 ●メモリー：256GB（32GBx8）DDR4-3200 ECC Registerd ●ストレージ：SSD 960GB ●OS：なし Ubuntu 20.04 LTS もしくは Windows10 Pro for Workstation 64bit 選択可能

## アカデミック特別価格

大学、大学院等の学校教育法で定められた教育機関（アカデミック）のお客様向け特別価格

| | | |
|---|---|---|
| | NVIDIA® RTX A6000 | 特別価格 ¥571,450（税込） |
| | NVIDIA® A100 80GB | 特別価格 お問い合わせください。 |

ジーデップ・アドバンスでは
最新の情報を毎日発信しています。

@GDEPAdvance
https://twitter.com/GDEPAdvance

NVIDIA ELITE PARTNER

GDEP Advance

株式会社ジーデップ・アドバンス
https://www.gdep.co.jp/

03-6803-0620
受付時間：平日/9:00 ～ 17:00

NVIDIA、NVIDIA ロゴは、アメリカ合衆国及びその他の国における NVIDIA Corporation の商標または登録商標です。/ 記載されている製品名等は各社の商標または登録商標です。/ 仕様、構成、などは、予告なく変更される場合があります。

JUBILANT BIOSYS

# Reimagining Drug Discovery

## Tackling challenges from Target ID to Commercial Supplies

- Medicinal Chemistry
- Discovery Chemistry
- In-vitro ADME In-vivo pharmacology
- Process research & Scale-up
- Clinical & Commercial Supplies

**1200+** Personnel

**85+** Programs

**100+** Customers

CIRC Chemistry Innovation Research Center, Greater Noida

INDC Investigational New Drug Center, Noida

IDDC Integrated Drug Discovery Center, Bengaluru

Manufacturing Plant, Nanjangud

日本担当：城戸　佳織

Phone: 080 1053 7318

E-mail: kaori.kido@jubilantbiosys.com

価値ある情報を迅速に

## 特許化合物-生物活性データベース

業界最大級

## データキュレーションサービス

特許/文献1報から対応可能

知識共有や生産性を向上

## ELN/RegMol/

幅広い創薬モダリティに対応したクラウド型電子実験ノート

分子情報及びアッセイデータ登録システム

低分子から高分子まで登録可能

時間とコストの効率化

## makya

化合物構造発生の為のAIプラットフォーム

タンパク質構造およびリガンドに基づく創薬を加速

## spaya.ai

データ駆動型逆合成解析プラットフォーム

価値ある合成ルートを探索可

evolvus

SCIELLIGENCE

IKTOS

Artificial Intelligence for new drug design

ChemoInfo

新しい革新的な方法

## Effiris

化合物設計を促進する二次薬理学モデル群

より効率的な、情報に基づいた化合物のトリアージと優先順位付けが可能

Lhasa Limited

PRESCIENCE INSILICO

## 計算化学外注サービス

ご要望に沿った依頼が可能

ケモインフォマティクス/計算化学技術で

# 創薬イノベーションを加速します

ChemoInfo

ケモインフォ株式会社

Email : contact@chemo-info.com

URL : https://chemo-info.com/

詳細はこちらから

お気軽にお問い合わせください

aws

MOLSIS
Molecular Simulation and Informatics Systems

WORLD FUSION

QUANTINUUM

Schrödinger
シュレーディンガー株式会社

QSLSI

ELIX
Dotmatics

OpenEye
SCIENTIFIC
CADENCE MOLECULAR SCIENCES

ELSEVIER

FUJITSU

ATTRIBUTE

RIKEN

CABC'S

Patcore

infocom

CONFLEX
HIGH PERFORMANCE
Conformation Analysis

BRUKER

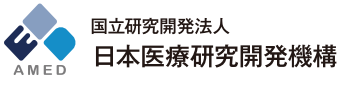
計算科学
Computational Science K.K

BIOVIA

NVIDIA

iSiP

Lifematics


AMED
国立研究開発法人
日本医療研究開発機構

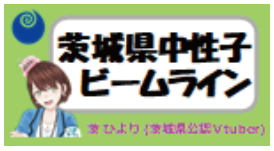
NVIDIA
ELITE
PARTNER

DEP
Aduance

SCSK

神戸天然物化学株式会社
KNC Laboratories Co.,Ltd.

FUJIFILM
FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation


茨城県中性子ビームライン

REPERTOIRE
GENESIS

MKI
三井情報株式会社

エヌ・ティー・エス

JUBILANT
BIOSYS

ChemInfo

# CBI 学会 2023 年大会　開催のご案内

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

会期：2023 年 10 月 24 日(火)－26 日(木)

次世代ヘルスケアの実現に向けて、ゲノム情報や医療・健康情報の大規模データの利活用が国内外で急速に進んでおり、創薬においてはすでに全ゲノム情報の活用が強力なアプローチとなっています。実際、ヒト遺伝学が薬剤開発の成功確率を上げることが明らかになり、臨床試験 Phase I までの開発品の中で、ヒト遺伝学的な背景がある薬剤の承認確率は約 4 倍とされています。Missense・Deleterious 変異の時には、さらに成功確率が上がるといわれています。特に印象的なのは、2021 年に米国 FDA により承認された新規薬剤の 3 分の 2 は、ヒト遺伝学のエビデンスに基づくものであったという報告です。すなわち、創薬においては、ゲノム情報を活用して、いかに開発期間を短縮し、成功確率を上げるかが重要課題になっています。

このような状況の中で、英国では Genomics England が Discovery Forum を形成し、製薬・臨床検査・バイオインフォマティクス等に関わる、日本企業を含む 120 社以上が参画して、ゲノム情報や医療情報を活用した創薬、次世代ヘルスケアの開発が始められています。国内でも、製薬企業を中心に日本人のゲノム情報基盤の拡充を求める声が高まり、東北大学東北メディカル・メガバンク機構が、文部科学省及び、同機構が製薬企業 5 社と形成した「全ゲノム情報と医療・健康情報の統合解析コンソーシアム」と協力して、前向きコホートに参加している一般住民 10 万人の全ゲノム情報と医療・健康情報の統合解析を通じた、革新的な医薬品開発を推進しています。

さて、2023 年度の CBI 学会大会では、大規模データを利活用し、情報科学、計算化学、創薬化学、生物学、医療などの分野で、次世代ヘルスケアの開発で活躍されている研究者、専門家の先生をお招きして、講演して頂きます。ウィズ・ポストコロナにより加速した DX を背景に、いかにゲノム情報、医療・健康情報の基盤を形成し、データサイエンス・AI を活用して、新しい医療・創薬の実現に挑むか、その戦略を一緒に考えましょう。最新の研究を共有し、そして、今後私たちが向かうべき方向性を議論する機会になれば幸いです。

医療・創薬関係者だけではなく、幅広く健康と暮らしに関係する産業界の方々、また、アカデミアの方々のご参加、さらに、大規模データを利活用して実際に次世代ヘルスケアの実現に取り組んでいる方々はもちろん、これから始めてみようという興味をお持ちの方々の積極的なご参加、をお待ちしております。

CBI 学会 2023 年大会
大会長　　山本 雅之（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構）
実行委員長　　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）

CBI 学会 2022 年大会
2022 年 10 月 24 日発行

編集責任：坂田 恒昭　福澤 薫
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　高澤 恵　藤田 真澄
発行：CBI 学会 2022 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 2022
October 24, 2022

Editor in chief : Tsuneaki Sakata, Kaori Fukuzawa
Production Director : Akihiko Konagaya
Production Staff :
Yoko Ozawa, Naomi Komiyama, Mari Shiozuka,
Sae Kishi, Megumi Takazawa, Masumi Fujita
Published by :
Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2022

E-mail : cbi2022@cbi-society.org
URL: https://cbi-society.org/taikai/taikai22/
Copyright© 2022CBI Society All rights reserved.
ISBN : 978-4-910628-05-9