

10月24日（月）

October 24

<市民講座> 小ホール

『分子ロボットと循環農工業：持続可能な未来を目指して』

司会：山村 雅幸（東京工業大学）

小長谷 明彦（東京工業大学名誉教授）

大津 巖生（筑波大学大学院）

浜田 省吾（東北大学）

西田 暁史（東京農業大学）

吉田 省子（北海道大学）

<チュートリアル> 研修室・401

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

モデレーター：湯田 浩太郎（株式会社インシリコデータ）

講師：

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」

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」

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」

講師交渉中（NVIDIA）「未定」

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」

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

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-

モデレーター：加藤 幸一郎（九州大学）

高谷 大輔（大阪大学）

渡邊 千鶴（理化学研究所）

講師：

神坂 紀久子（理化学研究所生命機能科学研究センター）

「FMO DB の紹介、動的平均 FMO リガンド-タンパク質間相互作用
解析」

宮川 柊兵（星薬科大学）

「FMO DB を活用したリガンド-核酸-タンパク質間相互作用解析」

化学関連研究支援システムの理解、確認、適用 Understanding and confirmation of the research support systems

化学関連研究支援システムの適用や利用は殆ど総ての化学分野で実施され、研究者にとり必需品となっている。研究支援システムの選択、適用、理解が不十分であれば研究そのものの信頼性欠如、研究の失敗、時間や費用の無駄とその影響は破壊的となる。また、化学研究支援システムは常に単体で稼働するものではなく、データの収集や関連システムとの連携等にも考慮が必要であり、この場合の連携性も大事となる。また、より大きい観点では、会社のデータ管理システムとの連携等も必要で、これらを考慮しなければシステムの管理すら出来なくなる。

研究支援システムは単に機能的な観点のみならず、様々な観点からの考慮が大切である。また、自分の研究に必要な機能の最適化（システム利用、委託開発、コンサルタント、自主開発、他）を目指しての戦略から戦術への慎重な検討が必要である。

以下に現時点で取りうる研究支援システムの検討についての可能性を列挙する。

1. 既存の研究支援システムの概要、適用、他
2. 研究目的内容を実現するシステムを委託開発して構築する
3. 研究支援システムと支援システムの適用コンサルを受ける
4. ITに興味があり、特に自分の研究でのカスタマイズ等自分で試みる
5. 複数の支援システムを用いて、従来にはなかった独自の研究目的を実施する
6. 化学研究支援システム適用上での重要な留意事項

研究支援システムは、職人の道具と同じである。自分の研究に最適なシステムを使ってこそ実りある研究成果を享受できる。さもなければ、間違った結果、現場での混乱、社内システムとの非連携性、システムの更新やシステム間連携等も出来なくなる。研究の大事な道具である、研究支援システムは、職人の道具以上に慎重に決めることが重要である。

今回は、研究支援システムの選択、構築、コンサル適用、システム関連アプリ、システム連携や、研究支援システムとして留意すべき様々な点に関する討論をチュートリアル形式で行う。

モデレーター： 湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)
株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

13:00～13:10

◇開会の挨拶と開催趣旨（研究支援システムの様々な選択、開発、適用、利用形態）説明

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

13:10～13:50

1. 演題：「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」

演者：東田 欣也 (Kinya Toda)
株式会社モルシス (MOLSI Inc.)

13:50～14:30

2. 演題：「富士通が行う、AI 創薬のための研究支援」

演者：古賀 裕美 (Hiromi Koga)
富士通 (Fujitsu, Ltd.)

14:30～14:40

◆休憩 (10分)

14:40～15:20

3. 演題：「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」

演者：結城 伸哉 (Shinya Yuki)
株式会社 Elix (Elix, Inc.)

15:20～16:00

4. 演題：未定

演者：未定

NVIDIA (Nvidia Corporation)

16:00～16:30

5. 演題：「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」

湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)

株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

16:30～17:00

6. 演題：「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

湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)

株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

参加ご希望の方へ

★CBI学会2022年大会への参加登録後、チュートリアルの参加登録を行ってください。

大会参加登録：[>こちらから](#)

チュートリアル参加登録（無料）：<https://forms.gle/sbTbNp6Mc1BKGFKTA>

★事前準備について

当日の実践操作のためのツール、プログラム、データを事前にご準備ください。

[>詳細はこちらから](#)

日時：2022年10月24日13:00-17:00

チュートリアル参加費：無料 ただし、CBI学会2022年大会への参加登録(有料)が必要です。

開催趣旨：

フラグメント分子軌道（FMO）計算結果を収載したFMOデータベース(FMODB; (<https://drugdesign.riken.jp/FMODB/>)) は、2019年2月の一般公開以来データ数を増やし、8月10日時点で14,924構造を公開している。最近では、富岳等のスパコンを用いたMDスナップショット等の大規模データを用いたFMO計算が始まっている。また、創薬ターゲットタンパク質に限らず、核酸等の様々な生体高分子に対するFMO解析及びデータ収集の取り組みが広がっている。本セッションでは、FMODBの概要を紹介するとともに、実際にFMODBに登録されているデータを用いて、創薬研究に用いるための解析方法について紹介する。FMODBの詳細を知りたい方、実際にFMO計算結果を解析してみたい方のご参加をお待ちします。

モデレーター：

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

高谷 大輔 Daisuke Takaya (大阪大学 Osaka University)

渡邊千鶴 Chiduru Watanabe (理化学研究所 RIKEN BDR)

1. 13:00-13:05

はじめに

高谷 大輔 Daisuke Takaya (大阪大学 Osaka University)

2. 13:05-14:35

＜チュートリアル＞ FMODBの紹介、動的平均FMOリガンド-タンパク質間相互作用解析

神坂 紀久子 Kikuko Kamisaka (理化学研究所生命機能科学研究センター RIKEN BDR)

量子化学計算の一つであるFMO法により得られる相互作用エネルギー(IFIE/PIEDA)はタンパク質-リガンド間相互作用解析及び創薬研究への応用が期待されている。私たちのグループではFMO計算データの蓄積を目的としたFMODBを開発し、FMODDコンソーシアムのメンバーによる計算、自動化前処理プロトコルで計算された結果等のFMOデータを閲覧するための簡便なインターフェイスをホームページから提供している。本セッションではFMODBが提供する機能や開発状況について紹介する。また、最新の機能としてMDスナップショットのような一連のデータセットに対するリガンド-タンパク質間のIFIE/PIEDA解析を行い、構造揺らぎを考慮した動的平均IFIE/PIEDAと活性値との相関を導出する。

14:35-14:55 休憩

3. 14:55-16:25

<チュートリアル> FMO DBを活用したリガンド-核酸-タンパク質間相互作用解析

宮川 柊兵 Shuhei Miyakawa (星薬科大学 Hoshi University)

リガンド-核酸-タンパク質の複合体における相互作用解析について、COVID-19関連タンパク質であるRNA依存性RNAポリメラーゼ (RdRp, RNA dependent RNA Polymerase) とレムデシビルの複合体を例に、FMO DBのwebインターフェイスおよびBioStation Viewerを用いた解析を行う。関連研究の最新動向を紹介すると共に、核酸を含む系の相互作用解析に必須となるラダー図の作成などを実践する。

4. 16:25-16:35

まとめ

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

5. 16:35-17:00

個別相談等

*各チュートリアルの途中で適宜休憩をはさむ予定です。

★事前の準備について

チュートリアルでの説明と並行して、実際にFMO DB、BioStation Viewerの操作を行っていただきます。希望者はFMO創薬コンソーシアムのホームページから公開されているBioStation Viewerの事前インストールを行ってください。BioStation Viewer は以下のページからダウンロードできます：

<https://fmodd.jp/biostationviewer-dl/>

なおチュートリアルで実際に使用する最新版のBioStation Viewer等のプログラムやデータについては、チュートリアル開催の一週間前 (10/17)をめどに下記のサイトでご案内する予定です。

<https://drugdesign.riken.jp/pub/CBI2022tut/>

連絡先：CBI学会2022年大会事務局