

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~
CBI Young Researchers, Our RX
~New Career, New Collaboration~

AI、そしてデジタルコミュニケーションをはじめとする DX 技術の急激な発達により、今後研究は大きく変わっていきます。CBI 若手の会では、新しい時代の研究者の声を発信し、新しい研究アイデア、新しいコラボレーションを生み出し、多様なキャリアを後押しする活動を行っています。

本フォーカストセッションでは、データサイエンス、AI、インシリコ創薬分野で活躍している研究者にスポットを当て、各々の挑戦的な課題に対する最新の研究内容についてお話頂くのとともに、本セッションに参加する皆様と議論を交え、新しいコラボレーションが生まれるきっかけをつくりたいと思います。

モデレーター: 渡邊怜子 (大阪大学)、渡邊博文 ((株)ウィズメーティス)、高橋一敏 (味の素(株))

1. インシリコ創薬を加速するデータとモデルの扱い方

江崎 剛史 (Tsuyoshi Esaki)

滋賀大学 (Shiga Univ.)

膨大なデータを有効活用して創薬に活かすためには、実験条件が統一されたデータを多く集め、インシリコモデルを構築することが重要である。そして、集めたデータや構築したモデルは、世界中の研究者に共有し、自由に使える環境として整えることも必要となる。本講演では、データ分析の土台となるデータのキュレーションとモデル共有について議論したい。

2. 公共データを用いた AI モデルの中分子創薬への応用

清水 祐吾 (Yugo Shimizu)

慶應義塾大学 (Keio University)

AI 創薬において ChEMBL や PubChem 等の公共データベースは重要なデータ取得源となっている。一方で、実際に開発に用いる化合物と公共データベースに含まれる化合物の間には化合物空間上において大きな距離があることが多く、公共データで学習した AI モデルの適用には限界がある。本講演ではこのような事象の例として、タンパク質間相互作用標的を対象とした、(新たなモダリティである)中分子による阻害剤探索における公共データモデルの実情と新規実験データの取得によるモデル精度向上の手法について紹介する。また、この手法を活用した感染症への取り組みについても紹介する。

3. よろしい、ならば創薬だ—— 人類総創薬プレイヤー時代へ

叢雲くすり (Kusuri Murakumo; @souyakuchan)

化合物空間 (chemical.space)

計算創薬手法の開発・活用は広まってきたものの、既存のベンチマークセットではなく現実の創薬標的を対象として実地経験を積める機会(個別プロジェクトとして予算が獲得できていない限りは)少ない。測定済みデータセットでお膳立てされたコンペは珍しくないが、本来の創薬研究開発で行われるように任意の構造の活性化合物候補が提案されると、新たに実測しないと意味が無いので競技化するのが難しい。一方、実際にアッセイの実施を催しに含め、予測へのフィードバックが参加者に与えられる形式のイベントも近年いくつか開催されており、腕を磨くには好適な機会となっている。オープンサイエンス潮流を汲んだ COVID Moonshot のような実戦の試みもある。それぞれ実際に参加してみた上での概観を紹介する。プレイヤーの裾野が広がることを期待したい。

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)