

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第 5 卷第 3 号

2017 年 8 月 31 日発行

目次

(1) CBI 学会 2017 年大会フォーカストセッション紹介	1
(2) 第 5 回 個別化医療研究会報告	6
(3) CBI ジャーナル便り (10)	7
(4) 講演会報告	10
(5) 委員会報告	19



CBI 学会 2017 年大会

データ駆動型研究が拓く創薬

日時：2017 年 10 月 3 日 (火) – 5 日 (木)
会場：タワーホール船堀 (東京都江戸川区船堀 4-1-1)
オーガナイザー：大会長 堀本 勝久 (産業技術総合研究所)、
大会実行委員長 広川 貴次 (産業技術総合研究所)
大会プログラム委員長 石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)
大会ホームページ：<http://cbi-society.org/taikai/taikai17/index.html>

フォーカストセッションのご紹介

今年度の大会でも 18 のフォーカストセッションを企画しています。
本号では、大会中に開催されるフォーカストセッションの詳細をご紹介します。

計算毒性学と人工知能 (1)

– 計算毒性学における人工知能の基本。過去、現在そして今後 –

インシリコ技術による化合物の毒性評価/予測は薬理活性やADME等と異なり論理的なアプローチが極めて取りにくい分野である。このために本研究分野では当初より化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)によるアプローチと人工知能によるアプローチが試みられてきた。現在、人工知能関連技術が注目され、経済産業省による化合物毒性評価に関する国のPJが発足した。最近の人工知能技術はケモメトリックスの基本技術の一つである機械学習が拡張展開されたもので、特に深層学習(ディープラーニング)が注目されている。

本フォーカストセッションでは、最初にインシリコによる化合物毒性評価の基本をまとめる。続いて、現在世界的に展開されている人工知能(ルールベース型)による毒性評価支援システムのDerekシステムをご紹介いただく。最後に、今後の人工知能技術を適用した化合物毒性予測システムPJ(AI-SHIPSプロジェクト)の立ち上げに関するご講演をいただく。なお、このAI-SHIPSプロジェクトに関する具体的な講演はFS-15のフォーカストセッション「計算毒性学と人工知能(2)」(10月5日: 13:30-15:00)に企画されていますので、ご参加ください。

モデレーター：湯田 浩太郎((株)インシリコデータ)、植沢 芳広(明治薬科大学)

「既存の分野に属さない先進的研究」 口頭発表

先端的計測技術

近年、抗体医薬品、核酸医薬品などのバイオ医薬品の開発が盛んである。生体高分子をベースにしたこれらの医薬品はより複雑な分子作用機序や分子動態を示すので、開発においては、その計測が鍵となる。本フォーカストセッションでは、気鋭の研究者に下記のテーマにて御発表いただく。

前半の3題では、生体観察のフルデジタル化の為に3つの技術について、御発表いただく。最初の鈴木和志先生(東京大学)からは、分子動態を観察する為の化学発光を用いた手法について御発表いただく。2人目の佐波晶先生(大日本印刷)からは、細胞画像をコンピューターに認識させる為の手法について、御発表いただく。3人目の菅原皓先生(エルピクセル)からは、得られた画像を人工知能に学習させ、画像解析を効率的に実行するためのプラットフォームについて御発表いただく。

後半の3題は、新規の薬物動態・安全性の評価系として生体計測と連携が期待される培養技術について、ご発表いただく。はじめに藤田聡史先生(産総研)から、細胞ベースアッセイを高密度で行う事を可能とする「細胞マイクロアレイ技術」とその応用について紹介いただく。2人目の杉浦慎治先生(産総研)からは、新しいがんの細胞診断法として期待される光分解性ハイドロゲルで培養したがん細胞の増殖能や形態の経時的観察と光照射により特定の細胞のみをゲル外に取り出す技術について発表いただく。3人目の古水雄志先生(崇城大学)からは、ナノ粒子であるハイブリッドリポソームのヒトがん幹細胞に対する効果を紹介いただく。

前半でご紹介いただく高感度・高精度な生体計測技術と後半の培養細胞をベースとした新規の薬物評価系との連携に関して広く御議論いただきたい。

モデレーター：石田 誠一(国立医薬品食品衛生研究所)、多田隈 尚史(大阪大学 蛋白質研究所)

「インシリコ創薬」分野 口頭発表

オミックスを原理的なところから考える——創薬の未来のために——

オミックスデータは、生物の基本的挙動を決めている。マイクロからマクロまでにわたる生物の各種挙動の多様性はオミックスデータより桁外れに大きい。従って、オミックスデータを解析することによって生物の複雑な挙動を理解し、応用研究につなげるということは、研究方針として自然である。しかし、オミックスデータ自体が非常に多様かつ大量であり、これまでの研究のアプローチは、ビッグデータの構築と検索が中心であった。本フォーカストセッションの趣旨は、非常に困難なこの未解決問題を原理的なところから深く考察し、オミックス解析の現状を打破する手掛かりにすることである。医薬学の未来を考えると、このような根本的な問題に対する議論が必要であり、今回のフォーカストセッションでは、問題意識の共有ができれば成功であると考えている。

モデレーター：美宅 成樹(名古屋大学名誉教授)、広川 貴次(産業技術総合研究所)、
荻島 創一(東北大学 東北メディカル・メガバンク機構)

計算毒性学と関連トピックス

計算毒性学(Computational Toxicology)の研究分野は様々な研究手法や内容から構成される。今回は永井先生に副作用に対するQSARの適用による副作用解析に関するアプローチの発表をいただく。また、Dr.Jordi Mestresには、最新のインシリコ手法を用いた解析の報告と、創薬に関する適用についての講演をいただく。最後に、湯田は8月開催されたWC10での発表報告とWC10で発表されたインシリコ関連テーマでの研究等に関する報告を行う。

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)、
狩野 敦(株式会社モルシス)

「第 5 回 オミックス解析における実務者意見交換会

ゲノム・トランスクリプトーム・プロテオーム・メタボロームをはじめとするオミックス解析は、次世代シーケンシングや機械学習をはじめとする革新的技術の普及と相まって、分子生物学のみならず医学・薬学・農学などの分野に発展をもたらしている。CBI 学会でも多くの研究者がオミックス解析に基づく医療や創薬、健康増進などに関する研究を進めており、発表演題も裾野が広がりつつある。そこで本セッションでは、「3) バイオインフォマティクスとその医学応用」のポスター分野に毎年ご発表いただいている研究室の先生方にご発表いただき、会場参加者を交えて同じ分野内での研究者の連携を深め、アカデミアや企業のコラボレーション等の契機となれば幸いである。

モデレーター：茂櫛 薫（順天堂大学）

「医薬品研究と ADMET」分野 口頭発表

「計算化学を利用した感染症研究の最前線

近年のめざましいコンピュータ技術の進歩と、新たな理論やアルゴリズムの開発によって、計算化学は医学・薬学を含む生命科学分野においても、実用的な研究手段と認識されつつある。一方、地球温暖化や人口増加に伴う生物生息域の変化と、交通機関の発達により、様々な感染症の驚異が我々の身近に迫っており、その克服は人類が取り組まなければならない最優先課題の一つといえる。本セッションでは、計算化学を利用して感染症研究に取り組んでいる先生方にご講演いただき、最先端の研究成果と今後の展望について議論する。

モデレーター：石川 岳志（長崎大学）、山岸 賢司（日本大学）、広川 貴次（産業技術総合研究所）

参加型ヘルスケアと迅速学習 -1

現在、ヘルスケアにおいては、ビッグデータや AI への関心が高まっており、ICT 企業の参入も国の研究支援も盛んになっている。しかし、サービスの視点からみると、それらは変化の始まりに過ぎない。次に来るのは、生活者が先導する参加型ヘルスケアと迅速学習の仕組みの組み込みである。

ICA（NPO 法人サイバー絆研究所）は、次世代ヘルスケアを特徴づける参加型ヘルスケアに実践的に取り組む努力を始めている。我々の最初の目標は、医師の処方箋を必要としない「薬にあらざる介入法（Non Pharmacological Intervention, 略して NPI）」を活用するための基盤的な仕組み Platform を整備することである。またそれと併行して、そのような基盤を活用した研究に自らも取り組むことである。

そのための準備的な課題も多数ある。その中で我々がとくに重要視しているのが、次の2つの活動である：

- (1) ヘルスケアの基盤である生物医学研究の成果を迅速に学べる仕組みづくり。
- (2) 進歩が猛烈な ICT を活用する能力（ICT Literacy）を習得し維持する仕組みづくり。

我々は、こうした仕組みを「迅速学習のシステム、あるいは環境、あるいはプラットフォーム（Rapid Learning System/Ecosystem/Platform）」と呼んでいる。迅速学習の仕組みをヘルスケアに組み込む重要性は、Rapid Learning Healthcare という概念として、米国ではすでに広く認識されており、取り組みへの努力が始まっている。

この連続した2つのセッション前半では、Rapid Learning Healthcare の概念を参加型ヘルスケアの視点から概説するとともに、事例を紹介する。

モデレーター：神沼 二真（NPO 法人サイバー絆研究所）

参加型ヘルスケアと迅速学習 -2

ICA は、参加型ヘルスケアの実践領域として、高齢者に多い複合化した慢性疾患の 3 次予防に関心をもっている。具体的には、肥満、糖尿病、腎疾患、飲酒による健康被害、さらに認知症などへの食事や運動などによる対処法や、がん体験者 (cancer survivors) への支援、低炭水化物食など特定の食事法 Diets の効果と危険性を見極め、さらに健康長寿をめざした対処法や生活様式の探索などである。その実践として、それらの活動を支援する基盤環境 Platform の構築を最初の目標にしている。その視点から注目しているのが腸内細菌研究である。

現在、「腸内細菌の健康と疾患への関わり Microbiome and Health and Disease」に関する研究は、猛烈に進歩、拡大、深化している。また、そこから得られてくる知識は、我々が関心をもっている上記の疾患領域に関係しているだけでなく、生活者が自ら実践してその効果を自ら体験してみることができる種類の知識であることが少なくない。しかし、そうした知識を活用するためには、実践者である参加者自身が、腸内細菌とその健康と疾患に関する知識を迅速に学習する必要がある。

そこで ICA は、爆発的に発展しているこの研究領域の成果を「腸内細菌を専門としていなかった」研究者や、一般の医療関係者や、Proactive な生活者 (あるいは患者) が、迅速に学習して自分たちの実践に生かせるようなプラットフォームの構築を、ICA の「参加型ヘルスケア」プロジェクトの最初の目標に定めた。このセッションでは、その内容や準備状況について簡単に紹介する。この目標を実現するためには、腸内細菌や代謝物解析の研究者や専門家だけでなく、データサイエンスに関わる研究者や専門家の積極的な協力が得られることが前提になる。これについても討議する。

モデレーター: 石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、中井 謙太 (東京大学)

「計算毒性学とリードアクロス

化合物規制分野では「リードアクロス」の適用による化合物の毒性評価が実施されている。このリードアクロスは化合物と諸特性との基本的且つ普遍的な関係である「似た化合物は似た特性を有する」に基づいて展開される。この原理からわかるように、類似化合物の選定や類似基準の設定等で様々なアプローチがあり、この点での討論等が重要になる。赤堀先生にはリードアクロスに関する講演をお願いする。花井先生には EU の化合物規制で極めて重要な REACH に関するご講演をいただく。湯田は WC10 で発表されたリードアクロス関連の研究発表について報告を行う。

最後に、参加の皆様と一緒に計算毒性学に関する様々な問題や内容等に関する討論を行う。

なお、本フォーカストセッションは日本動物実験代替法学会との協賛開催である。動物実験代替法学会では、シンポジウム「“リードアクロス”の基本と応用、現在および今後の化合物規制」で議論される。従いまして、本研究分野に興味ある方は参加されたい。

モデレーター: 湯田 浩太郎 (株式会社インシリコデータ)、赤堀 有美 ((財) 化学物質評価研究機構)

「バイオインフォマティクスとその医学応用」分野 口頭発表

計算毒性学と人工知能 (2) : 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)

近年、人工知能を毒性予測に適用する気運が高まっている。経済産業省では今年度より「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: PL 船津公人)」を開始した。本セッションでは多様な知を統合することにより化学物質のリスク評価の達成を目指すプロジェクトの概要と、人工知能の最新知見について紹介していただく。

モデレーター: 船津 公人 (東京大学)、植沢 芳広 (明治薬科大学)、
湯田 浩太郎 (株式会社インシリコデータ)

第 6 回個別化医療研究会「抗がん剤の個別化医療」

治療の最適化は、患者の遺伝的背景・生理的状态・疾患の状態に基づく個別化医療を通じて行われる。製薬企業はコンパニオン診断薬開発を含め創薬、開発、市販後調査において個別化医療を推進している。医療現場では個別化医療のために、バイオマーカー発現の有無の診断、病期分類に基づく治療方針の選択、リスク分類に基づく有害事象の予防、投与量の個別化などが行われている。今回は、抗がん剤治療にフォーカスをあて製薬企業および臨床の立場から議論を深める。

モデレーター：中村 光浩 (岐阜薬科大学)

ゼブラフィッシュを用いたヒト疾患モデルの構築と創薬への応用を目指した研究

熱帯魚ゼブラフィッシュはヒトと同じ脊椎動物であり、体のつくりや臓器の構造・機能などの多くの点でヒトとの共通性をもっています。またゼブラフィッシュの遺伝子のおよそ 80% は、ヒトゲノムに存在する遺伝子と同じ働きをもつ共通のものであると考えられています。そのためゼブラフィッシュは、ヒト遺伝子の機能やその異常による疾患を解析するためのモデル脊椎動物として世界中で研究に用いられています。このフォーカストセッションでは、ゼブラフィッシュを用いてヒト疾患およびそれに関連する生命現象～オートファジー、癌、筋萎縮性側索硬化症 (ALS) ～を対象にし、将来的にはヒト疾患の診断や治療につなげようと精力的に研究している新進気鋭の若手研究者が話題提供し、それについて議論したいと思います。

モデレーター：川上 浩一 (国立遺伝学研究所)

薬物動態・毒性の予測プラットフォームを目指して 創薬支援インフォマティクスシステム構築プロジェクトの紹介

平成 27 年 10 月より、AMED のプロジェクト「創薬支援インフォマティクスシステム構築」がスタートした。このプロジェクトは、医薬品開発を行う上で欠かせない薬物動態・毒性の問題点を効率的に解決するための予測プラットフォームを構築することを目標としており、実測データの収集、予測手法の開発、予測モデルの構築を 5 年間かけて実施する計画である。当日は、昨年に引き続きプロジェクトの概要と進捗を薬物動態、肝毒性、心毒性の 3 つの課題を担当している代表研究者に紹介していただき、議論する予定である。

モデレーター：本間 光貴 (理化学研究所)



◆◆ 第 5 回 個別化医療研究会 ◆◆

日時：2017 年 6 月 23 日（金）13:00-17:10

場所：岐阜薬科大学 大学院講義室（岐阜県岐阜市大学西一丁目 25 番地 4）

後援：日本薬学会東海支部、（一社）岐阜県薬剤師会、岐阜県病院薬剤師会

世話人：中村 光浩（岐阜薬科大学）、永澤 秀子（岐阜薬科大学）

プログラム：

- (1) 13:00-13:05 開会挨拶 原 英彰（岐阜薬科大学 副学長）
- (2) 13:10-14:00 「個別化医療に向け薬学部、薬剤師は何をすべきか？」
北市 清幸（岐阜薬科大学 医療薬理学大講座 薬物動態学研究室）
- (3) 14:00-14:50 「個別化医療に向けた治療薬・診断薬の開発とその課題」
尾崎 賢一（中外製薬（株）R&D ポートフォリオ部 R&D ネットワーク統括 G）
- (4) 15:00-15:50 「バイオマーカーを用いる臨床試験デザイン」
頭金 正博（名古屋市立大学 レギュラトリーサイエンス分野）
- (5) 15:50-16:40 「個別化医療の開発と信頼性確保について」
岸 達生（（独）医薬品医療機器総合機構 関西支部）
- (6) 16:40-17:10 総合討論

開催報告：

本研究会は、個別化医療をテーマとして臨床、アカデミア、企業、および行政の各分野から講師を招き開催しています。2015 年から今回で第 5 回目となり、情報計算化学生物学の枠にとらわれず各分野の方々のご参加をいただいております。参加者は 44 名でした。

今回は、4 名の講師の先生をお招きいたしました。最初の演者の北市清幸先生から、大学病院との共同研究としてオピオイド鎮痛薬投与患者の術後悪心嘔吐（Postoperative nausea and vomiting, PONV）の要因解析から、投与後 5 分後の感覚、浮遊感、年齢などの興味深いリスクファクターと薬物動態を交えた最新の知見の紹介がありました。さらに、臨床現場で個別化医療推進に大きな役割を果たすことになる臨床薬剤師の現状、薬学部教育の問題点、聴講している学生に対して望むことを熱く語っていただきました。

次いで、尾崎賢一先生から、個別化医療を牽引する製薬企業の立場からご講演を賜りました。ドライバー遺伝子の ALK、BRAF 研究の現状、ALK 融合遺伝子陽性の非小細胞肺癌（NSCLC）の治療 Alectinib などの臨床効果をインパクトのエビデンスと共に解説いただきました。また、Liquid Biopsy、がん免疫療法治療薬への期待、バイオマーカーに基づいたがん薬物療法へのパラダイムシフトなど多くの Hot な話題をお示しいただきました。

頭金正博先生からは、まずバイオマーカーを考慮した臨床研究の進め方を分かり易くご説明いただきました。特に着目するバイオマーカーの偽陽性、偽陰性の問題、種差、採取部位による heterogeneity の問題など、この領域に特徴的な考察の落とし穴についても説明されました。スティーブンスジョンソン症候群のゲノム解析の事例などの豊富な事例もご提示いただくことができました。

最後に岸達生先生から審査当局の立場から、PMDA が実施する信頼性調査の立場からご説明いただきました。まず法令、省令の説明、ついでリアルワールドデータの利活用について説明されました。レセプトデータ、MID-NET（統合データソース）、患者レジストリの活用例を具体的に説明されました。シダグリブチンの添付文書改訂やコデイン含有製剤の呼吸抑制など最新の事例をご講演いただきました。

各演者の質疑応答の時間に会場からも多くの議論・提案がなされました。運営について、全体で 30 分も時間が超過してしまい総合討論の時間が十分とれなかった反省点がございました。

今回の研究会に、ご協力頂きました皆様方、および参加頂いた方々に感謝申し上げます。

（文責 中村 光浩）

CBI ジャーナル便り (10)

CBI Chem-Bio Informatics Journal
Chem-Bio Informatics Society

◆ シミュレーションのみの論文も積極的に受理しております

CBI ジャーナルは「分子認識と分子計算」「インシリコ創薬」「バイオインフォマティクスとその医学応用」「医薬品研究と ADMET」「上記に属さない先進的研究」の5分野で、Original、Review、Communication、Opinion 論文の投稿を募っております。ジャーナルへの特徴として、シミュレーションのみの論文も積極的に受理しております。新たなアイデアや問題などについてできる限り早く報告し、研究の新規性と独創性を主張するポジションペーパーとしても CBI ジャーナルをご活用下さい。

◆ 論文受付から掲載までの期間短縮への対応

博士論文等、早急に論文掲載を要望される場合には CBI ジャーナル事務局までご連絡下さい。これまでに、論文受付から掲載まで1か月で対応した事例があります。
連絡先 : editor@cbi-society.org

◆ 投稿料の変更のお知らせ

CBI 学会会員の投稿料は、基本料金およびページ単価を無料としておりましたが、2018 年 1 月より以下の通り、基本料金のみ無料とさせていただきます。
引き続き、会員からの投稿を宜しくお願い致します。

投稿料 (2018 年 1 月改定)

- ・基本料金 20,000 円 (CBI 学会会員は無料)
- ・ページ単価 2,000 円 (ただし、公開原稿のページ数とする。)



◆ CBI ジャーナル新掲載論文

<Original>

「遺伝子ネットワーク同定後の事前知識利用法：複数の事前知識の統合」

木村 周平¹、北澤甲次¹、徳久 雅人¹、岡田 (畠山) 眞里子²¹鳥取大学大学院、²大阪大学蛋白質研究所

要旨：遺伝子発現データから有用な情報を抽出する手段の一つとして、遺伝子ネットワークに注目が集まっている。これまでに多くの遺伝子ネットワーク同定法が開発されている。しかしそれらの方法には一般に、多くの偽陽性相互作用を出力するという問題がある。偽陽性相互作用の数を減らすための方法の一つとして、対象のネットワークの性質を事前知識として利用する枠組みがある。これらの枠組みは、対象ネットワークが各相互作用を持つか否かを判断するために、計測された遺伝子発現データと与えられた事前知識を同時に利用する。これに対して本研究では遺伝子ネットワーク同定後に事前知識を利用する新たな枠組み “using a priori knowledge after genetic network inference” を確立する。この枠組みでは事前知識を、既に他の遺伝子ネットワーク同定法によって同定されたネットワークを改善するためだけに利用する。この枠組みに基づき、本研究では複数の事前知識を利用する新たな遺伝子ネットワーク同定法を開発する。提案手法は効果的に複数の事前知識を利用することで、全遺伝子間相互作用に対して自信度を割り当てる。実験において人工的な遺伝子ネットワーク同定問題と実際の遺伝子ネットワーク同定問題に適用することで、提案手法の有効性を確認する。提案手法によって複数の事前知識を利用して改善できる性能は僅かであるが、提案手法の枠組みは多くの遺伝子ネットワーク同定法に適用することが可能であり、それらの手法の性能を改善することができると考えられる。

「一本鎖 DNA、結合タンパク質、および DNA – タンパク質複合体の水和：

フラグメント分子軌道法の計算条件」

古明地 勇人¹、沖山 佳生²、望月 祐志^{3,4}、福澤 薫^{4,5}¹産業技術総合研究所、²国立医薬品食品衛生研究所、³立教大学、⁴東京大学生産技術研究所、⁵星薬科大学

要旨：一本鎖 DNA、結合タンパク質、両者の複合体の三種類の分子系それぞれについて、陽溶媒 (explicit solvent) で水和して、フラグメント分子軌道法 (FMO) を行った。目的は、これらの分子系の電子状態への水和の影響を調べることと、それにより、FMO 計算の適切な条件を見つけることである。そのために、それぞれの分子系について、溶媒の厚みを変えた水和構造のシリーズを作り、MP2/6-31G* で FMO 計算を行った。そして、溶質部分の電荷、溶質の内部エネルギー、溶質 - 溶媒間相互作用エネルギーを、溶媒の厚みの関数として算出した。これらの物理量は、三つの分子系すべてにおいて、溶媒の厚み 6 Å で、ほぼ収束した。それは、系の電荷の中和の有無には、

ほとんど左右されなかった。つまり、水和第1層と第2層が、溶質分子の電子状態に決定的な影響を持っていて、それより外の溶媒やイオンの影響は小さいことが示された。今回の結果は、別の分子種に関する既往研究と一致している。以上の結果と、安全係数を考慮すると、今回の分子系の FMO 計算には、8 Å 程度の厚みの溶媒があれば十分と判断できる。

<Communication>

WNK キナーゼ選択的阻害剤のための競合フラグメントアッセイ

齊藤 奈英¹、多田 幸雄²、岡部 隆義¹、長野 哲雄¹

¹ 東京大学創薬機構、² 東京工業大学

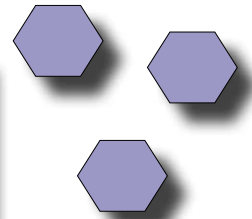
要旨：偽性低アルドステロン II 型は、常染色体優性遺伝疾患であり非常に稀な家族性高血圧症である。これは、WNK1 [with no K (lysine) protein kinase-1] あるいは WNK4 の機能亢進に起因するとされている。これらの WNK は、多くのキナーゼに存在する β_3 strand のリジン残基がシステインに置き換わっており、また、ATP 結合サイトのすぐ後ろにバックポケットがあるという特徴的な構造をしている。したがって、この特徴的なバックポケット及び活性に重要な役割を果たしていることも知られているグリシンリッチループにあるリジン残基 (WNK1 の Lys233) と相互作用する化合物は、WNK1 及び WNK4 の選択的阻害剤であることが予測される。本研究では、フラグメントライブラリー化合物及び競合結合アッセイを用いて、ヒンジ領域ではなく、バックポケットと選択的に相互作用する化合物を選択した。得られた化合物は、1,3- イソキノリンジオールと 4-メチル 1,3- イソキノリンジオールであった。これらの化合物にプロトンドナーとなる置換基を導入すると、Leu369 (WNK1) に水素結合し、WNK1 及び WNK4 に対する選択的な阻害剤を得るためのリード化合物となると予想される。



CBI ジャーナルは J-STAGE にて論文を公開しています
<https://www.jstage.jst.go.jp/browse/cbij/-char/en>

CBI ジャーナル編集委員会

講演会 記録



第 383 回 CBI 学会 講演会

「健康と疾病予防に向けたビッグデータ解析」

日時：2017 年 5 月 12 日（金）13:00-17:25

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル（大阪市北区大深町 3-1）北館タワー C 9 階 VisLab OSAKA

世話人：坂田 恒昭（阪大）、水口 賢司（医薬健栄研）

プログラム：

- (1) 13:00-13:50 「東北メディカル・メガバンク計画の目標と進捗状況
－世界最先端のバイオバンクの構築を目指して－」
山本 雅之（東北大学 東北メディカル・メガバンク機構）
- (2) 13:50-14:40 「疫学手法を用いた遺伝子・細菌叢研究」
宮地 元彦（医薬基盤・健康・栄養研究所）
- (3) 14:40-15:30 「腸内環境に関連するビッグデータの集積と
健康科学、創薬、機能性食品開発への展望」
國澤 純（医薬基盤・健康・栄養研究所）
- (4) 15:45-16:35 「乳児期におけるビフィズス菌優勢菌叢の形成と乳児の健康との関わり
－腸内細菌叢および腸内細菌ゲノム解析における
バイオインフォマティクスの有用性－」
松木 隆広（ヤクルト中央研究所）
- (5) 16:35-17:25 「富士通研究所の人工知能研究の取り組み」
丸山 文宏（富士通研究所）

開催報告：

従来からの臨床情報や各種実験データとはやや異なった形で、ウェアラブルデバイス等からの大量のデータ取得が可能になり、これらのデータの利用は医学や創薬科学の境界を変えようとしている。そこで、「健康と疾病予防に向けたビッグデータ解析」と題した研究講演会を企画し、生活習慣や身体活動から腸内細菌叢に至る幅広いデータに関して、それらの解析に携わっている第一線の研究者にご講演頂いて議論を深める場を持った。

まず、東北大学 東北メディカル・メガバンク機構長の山本雅之先生から、東日本大震災被災地の医療復興を進めるとともに、未来型の地域医療モデルを創出する基盤事業としての日本を代表するコホート研究である東北メディカル・メガバンクの紹介があった。宮城県及び岩手県在住約 8 万 4 千人の地域住民コホート



のリクルートと7万人を超える三世代コホートのリクルートを達成しているとのことであった。東北メディカル・メガバンクでは日本人の遺伝子情報の全体像を明らかにする目的で、コホート参加者の全ゲノム配列解析を進めている。また、日本人のゲノム解析に特化したジャポニカアレイを開発し、その成果を社会実装している。これらの試みは、今後の個別化予防医療に役立つことが期待される、

次に、医薬基盤・健康・栄養研究所、身体活動研究部部長の宮地元彦先生には、スポーツ科学の観点から、疫学手法を用いた遺伝子・細菌叢研究についてご講演頂いた。ウェアラブルデバイスなどを用いた科学的研究のパイオニアとして、食事や身体活動などの生活習慣データと遺伝子や腸内細菌叢などを結びつける新たな試みをご紹介頂いた。

続いての演者、医薬基盤・健康・栄養研究所、ワクチンマテリアルプロジェクトリーダーの國澤純先生は、食事や腸内細菌を介した免疫制御と生体応答の分野で、基礎研究から応用まで幅広くご活躍中であり、基礎研究の成果を活かした創薬への展開や機能性食品開発、さらには宮地先生と共に勧められているコホート研究から得られたビッグデータのデータベース化から健康科学に向けた取り組みなどについてお話頂いた。

四番目の演者のヤクルト中央研究所松本隆広先生は近年の腸内腸内菌叢研究の動向と乳児におけるビフィズス菌の定着意義、菌叢およびゲノム解析における NGS とバイオインフォマティクス導入の有用性についての発表を行った。次世代シーケンサー（NGS）およびバイオインフォマティクスは、数多くの腸内菌の遺伝子の中から、宿主との共生に重要な遺伝子を見出すのに極めて有用なツールであり、インフォマティクスと、従来の実験科学を組み合わせることで、腸内菌叢と宿主の健康との関連性のメカニズム研究がさらに進展することが期待できる発表であった。

最後に、富士通研究所、人工知能研究所の丸山文宏先生からは、近年大きな注目を集めている人工知能技術の動向の概観と、富士通研究所における最先端の研究について、ウェアラブルデバイスデータの解析から化合物設計に至る広範な応用を含めてご紹介頂いた。

参加者は 100 名を超え、活発な質疑応答が行われた有意義な会となった。



山本雅之先生



宮地元彦先生



國澤純先生



松本隆広先生



丸山文宏先生

第 384 回 CBI 学会 講演会

「核酸創薬」

日時：2017 年 5 月 25 日（木）13:15-17:40

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター（CIC 田町）1 階 国際会議室（東京都港区芝浦 3-3-6）

世話人：高土居 雅法（杏林製薬株式会社）、嶋根 みゆき（中外製薬株式会社）、片倉 晋一（第一三共 RD ノバール株式会社）

プログラム：

- (1) 13:15-13:20 はじめに
- (2) 13:20-14:20 「核酸医薬の臨床応用」
黒田 雅彦（東京医科大学）
- (3) 14:20-15:20 「化学修飾による立体障害を利用したヒト全遺伝子に対する 1 遺伝子特異的ノックダウン」
程 久美子（東京大学）
- (4) 15:35-16:35 「ENA オリゴヌクレチドを用いた核酸医薬研究」
小泉 誠（第一三共株式会社）
- (5) 16:35-17:35 「高分子材料を基盤とする核酸医薬デリバリー」
宮田 完二郎（東京大学）
- (6) 17:35 - 総括

開催報告：

2017 年 5 月 25 日に東京工業大学 CIC 田町にて開催した第 384 回 CBI 学会研究講演会「核酸創薬」について報告する。

核酸医薬は、核酸を疾患の原因となる DNA や RNA、あるいはタンパク質に直接作用させることで病態を改善、ないし治療させることを目的としている。低分子創薬における創薬標的の枯渇や抗体医薬の抱える問題点を解決できる可能性があることから、大変注目されている。現在、全世界で上市・承認された医薬品が 5 品目あると同時に多くの臨床試験中のものがあり、近い将来に爆発的な市場規模拡大が予想される等、創薬への潜在的な期待度が高まっているのが現状である。このような背景の下に下記 4 名の先生方にご講演いただいた。



参加者は講師と世話人を含め 126 名を数え、本領域の関心の深さがうかがえた。講演では、まず、東京医科大学の黒田雅彦先生に核酸医薬の概要とご自身の眼やがん領域、さらにエクソソームを活用した DDS 研究の一端について紹介して頂いた。次に、東京大学の程久美子先生に siRNA の配列規則性と塩基対合力に関するデータを基にした論理的な化学修飾によるオフターゲット効果の低減を、最新の研究成果も交えてご紹介頂いた。続いて第一三共の小泉誠先生には、ENA（エチレン架橋型核酸）オリゴヌクレチ



黒田雅彦先生



程久美子先生



小泉誠先生



宮田完二郎先生

ドを用いた核酸医薬研究と題して世界的な核酸医薬開発の現状と自社の研究状況をご紹介頂いた。最後に、東京大学の宮田完二郎先生に PEG とカチオン性ポリアミノ酸から成るポリイオン複合体を用いた核酸医薬の DDS 研究をお話し頂いた。

核酸医薬は化学合成が可能な点、抗体では送達不可能な臓器に対しても移行できる点、従来は undruggable な創薬標的を druggable にできる可能性を有する点、加えて極めて高い作用持続性が見込める点等、創薬の観点からも非常に魅力的な領域である。4 名の先生のご講演を通して将来展望も見えたことから、企業の創薬研究者にとって非常に意義深い会となった。今後の研究の重層化により、多くの核酸医薬が一日も早く上市されることが期待される。

第 385 回 CBI 学会 講演会

「感染症研究の将来 ～グローバルヘルスに貢献する創薬～」

日時：2017 年 6 月 9 日（金）10:00-17:40

場所：東京大学医学部総合中央館 医学図書館 333 会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：杉山 雄一（理化学研究所）、前田 和哉（東京大学大学院薬学系研究科）

プログラム：

- (1) 10:00-10:10 「はじめに」
杉山 雄一（理化学研究所）
- (2) 10:10-11:05 「複雑な薬物間相互作用の定量的予測にかかる現状と課題、そしてその克服へ向けて」
前田 和哉（東京大学大学院薬学系研究科）
- (3) 11:05-12:05 「動態予測における bottom-up approach と top-down approach の統合の必要性」
杉山 雄一（理化学研究所）
- (4) 13:10-13:55 「薬物間相互作用および個人間変動の予測に重要な当該代謝酵素、
トランスポーターの寄与率（fm, ftr, Rdif）の推定における諸問題」
吉門 崇（横浜薬科大学薬学部）
- (5) 13:55-14:40 「肝取り込みトランスポーター（OATPs）、胆汁排泄トランスポーター（MRP2）機能の
バイオマーカーとしてのビリルビンおよびそのグルクロン酸抱合体の
有用性；P B P K モデルを用いた解析」
宮内 正二（東邦大学薬学部）
- (6) 14:55-15:35 「バーチャルクリニカルスタディ（VCS）の適用；タモキシフェン有用性の評価」
中村 利通（帝人ファーマ株式会社）
- (7) 15:35-16:15 「企業研究における探索段階での Time dependent inhibition（TDI）の諸問題の解決と
効果的なリスク評価法の設定」
小杉 洋平（武田薬品工業株式会社）
- (8) 16:15-16:55 「トランスレーショナルリサーチイニシアチブ - システムズバイオロジーによる
right target - right patient へのチャレンジ -」
小川 武利（第一三共株式会社）
- (9) 16:55-17:05 「終わりに」
前田 和哉（東京大学大学院薬学系研究科）

開催報告：

これまで我々は、複数回の CBI 学会講演会を通じて、ヒト薬物動態の変動・個人差をあらゆる特殊な状況（遺伝子多型・薬物間相互作用等）において再現可能な生理学的薬物速度論（PBPK）モデルの構築を目指して、そのために有用な知見を与えてくれる演者をお呼びし、予測の精緻化に寄与する講演会を目指してきた。今回の講演会では、将来の数値モデル研究の展望の一つとして、薬物動態の予測のみならず、薬効・副作用の集団としての予測を目指

す virtual clinical trial (VCT) や、薬効メカニズムを生体分子の情報伝達パスウェイをモデル化することで論理的に説明する quantitative systems pharmacology (QSP) への発展が切望されていることを背景として、薬物動態のみならず薬効・クリニカルアウトカムの精度良い予測、創薬における decision making や数理モデル構築における問題点の洗い出しとその克服を目指すために必要な見解をお持ちの先生方にご講演をいただいた。

最初に、前田が複雑な薬物間相互作用を *in vitro* 実験データを用いて、数理モデル解析等により定量的に予測する際に問題となり得る *in vitro* data と *in vivo* data 間の乖離の実例を挙げると共に、その乖離の原因としてどのようなことが考えうるかについてサマリーを行った。創薬における PBPK モデル使用を考えると、できる限り早い段階での薬物動態予測の場合、臨床データはまだ得られていないこともあることから、モデルパラメータとして必然的に *in vitro* 実験データを適切に用いる“full bottom-up approach”による予測を行わざるを得ない。しかしながら、現段階においては、基質薬物のクリアランス、代謝・輸送に関わる各分子の寄与率、阻害薬の阻害定数等定量的な予測を進める上で重要となるパラメータ一つ一つが *in vitro* data の単なるスケールアップでは設定できず、その原因探索が進められている現状が紹介された。その中で、*in vitro* 実験に用いる細胞に関する活性評価のための実験手法や輸送・代謝活性を横並びに多施設間で比較可能とするために統一した評価基準の設定等が急務であることが確認された。



次に、理化学研究所の杉山先生には、動態予測における bottom-up approach と top-down approach によるパラメータ推定結果を統合化することで、より現実的な PBPK モデルパラメータの設定が可能となることを、薬物動態パラメータの予測に対する考え方の基礎的な部分から最新のデータまで含めて幅広くお話しいただいた。特に、臨床データと *in vitro* データを両方活用することにより、モデルパラメータを求める方法論を統一化し、複数の相互作用事例で同じように適用することで、恣意性が少ない一般化された PBPK モデル構築法について実例をあげながらお話しいただいた。また一方で、薬物に依存するモデルパラメータの情報収集も今後必要不可欠であり、そのためには各代謝酵素・トランスポーターに対する選択的プローブ薬物を用いた相互作用試験による阻害剤のヒト *in vivo* における阻害強度の設定など、ヒト臨床試験データの補完も行っていく必要があることが主張された。これらの検討を通じて、最終的には、基質・阻害剤それぞれの情報のモデルパラメータファイルを統一されたフォーマットの PBPK モデルに入れるだけで簡単にシミュレーションし、相互作用リスクを定量的に予測可能な“dynamic PISCS”の考え方が提案された。

横浜薬科大学の吉門先生は、PBPK モデル解析を行う上でキーとなる薬物依存的なパラメータである R_{dif} (受動輸送クリアランス / 能動輸送クリアランス)、 κ (細胞内における薬物の消失に向かう振り分け率)、 f_m (代謝酵素分子種の代謝クリアランス全体に占める寄与率)、 f_{tr} (トランスポーター分子種の能動輸送全体に占める寄与率) を



杉山雄一先生



前田和哉先生



吉門崇先生

推定するにあたってこれまでどのような取り組みがなされてきたかという方法論の紹介を中心にお話しただいた。また、臨床データと *in vitro* データの両方をうまく利用することで、PBPK モデルにおける適切なパラメータとして活用するための方法についても解析の実例を交えながらお話しただいた。限られた臨床データのみからの PBPK モデル構築を行おうとしても、□のように、いずれの値に固定しても臨床データの fitting が可能となる事例もあり、いくつかのパラメータは *in vitro* 実験による固定が必要であることが紹介された。今後、両方のアプローチの融合によるより精緻な PBPK モデルパラメータの設定が望まれる。

東邦大学の宮内先生には、薬物投与を経ることなく、内在性物質の中でトランスポーターのプローブ基質として輸送されているものを利用した相互作用リスク評価の一環として、肝取り込みトランスポーター OATPs、胆汁排泄



宮内正二先生



中村利通先生



小杉洋平先生



小川武利先生

トランスポーター MRP2 の良好な基質であるビリルビン・ビリルビングルクロニドの PBPK モデル構築に関するお話をいただいた。幸い、ビリルビンの体内動態に関連する OATPs, MRP2, UGT1A1 については、いずれの分子についても機能低下による遺伝病が知られており、個々の分子機能が欠損した時のビリルビン・ビリルビングルクロニドの体内動態の変動についても情報が豊富にあることから、それらを用いて PBPK モデルパラメータを設定可能であるという思想の元、その経緯について詳しくお話しただいた。最終的に、rifampicin 投与時のビリルビン・ビリルビングルクロニドの濃度推移の変動についてもある程度説明できるところまで到達しており、今後、薬物間相互作用リスクの評価にも有用であるかの検証に期待が寄せられる。

帝人ファーマの中村先生には、エストロゲン感受性の乳がん細胞に対する治療薬タモキシフェンの有効性について、CYP2D6 の多型などを考慮した上で、さらにあらゆる薬物動態・生理学的パラメータに平均値とばらつきの両方を設定して、ある集団中における薬物動態のばらつきを含めた予測を可能とする virtual clinical study (VCS) モデルを構築した話をされた。本モデルでは、タモキシフェン及びその代謝物の薬物動態の予測のみにとどまらず、乳がんに対する有効性とリンクすることで、集団中における奏効率を予測することにまで踏み込んだ解析を行っている。特に現在、慶応義塾大学において、CYP2D6 の遺伝子型に基づく個別化投与設計によるタモキシフェン有効性評価に関する臨床研究 (TARGET-1 study) が on going で進んでいる中で、その結果を臨床研究が終了前に予測する試みとして非常に画期的である。実際の結果の開示は本年度末とのことで、予測精度がどうであったのか非常に楽しみである。



武田薬品工業の小杉先生には、CYP の相互作用の中でも特に大きな問題となる time-dependent inhibition (TDI) の創薬段階における予測に関して留意すべきことや、簡便なリスク予測を支援する方法論の開発についてお話しただいた。*In vitro* 実験一つとっても、阻害薬を溶解している有機溶媒の種類一つで TDI 強度の見積もりが異なってくるため、社内で条件の最適化について検討を進めた結果を紹介いただいた。また、スクリーニングプロセスにおける TDI の予測ではできる限り簡便な試験法・判定が求められるが、少ない時

点のサンプリングによって求められた TDI による残存酵素活性とヒト血漿中非結合形薬物濃度の比を算出して、クライテリアを設定することで、AUC 上昇率 2 倍以上となるか否かを明確に区別できることが話された。さらにより動的な PBPK モデルを用いて、適切な TDI パラメータの設定を行うことで、AUC 上昇率をより定量的に予測できる事例もご紹介いただいた。消化管における TDI 強度の定量的予測については課題が残るが、創薬段階における迅速な decision においては非常に有効な方法であると考えられる。

最後に、第一三共株式会社の小川先生からは、これまでの薬物動態のモデリングとは全く異なり、薬物の作用点周りの分子パスウェイをシミュレーションすることで、病態を治癒する上で選択した薬効標的が十分な治療効果を期待する上で妥当であるかの評価や、適切な患者ごとによる薬の選択を支援できるような病態数理モデル (QSP モデル) の構築事例についてお話いただいた。COPD 患者の公共データベース上のトランスクリプトームデータおよび文献情報に基づく COPD 病態メカニズムに関する分子ネットワークの構築を通じて、roflumilast (PDE4 阻害薬) の臨床試験時における臨床アウトカム (FEV1) を再現することに成功した。さらに、その QSP モデルを用いて、PDF4/PDE7 の両方の阻害は、ある条件下においては PDE4 単独の阻害よりもより薬効を強める可能性があることを予見すると共に、COPD 患者群においてもサブクラスが存在し、PDE4 阻害薬の効き方に相違が生じうることを予測できた事例を紹介いただいた。薬効の分子メカニズムに基づくモデルは、パラメータ数が膨大になるため、個々のモデルパラメータの設定が困難であることが多いが、文献情報の整理や臨床試験との対合を絶えず取っていくことにより、疾患 QSP モデルが一たびできてしまえば、その疾患に対する分子メカニズムとしての理解を深められると共に、新たな創薬標的の探索や、患者層別化による right target-right patient に基づく投薬をますます進められるものと期待されるアプローチであることを確信した。

以上、薬物動態から薬効・臨床アウトカムの予測における数理モデル解析の有用性および今後の課題について、様々な観点から議論が展開された。複雑な臨床イベントの解析事例の集積に伴い、この領域も万人が利用可能な創薬ツールとして敷居が下がってきつつあるのを実感した。そのさらなる実現のためには、今後ますます、薬学のみならず、生化学・分子生物学や医学、統計学・情報科学等多領域の研究者が集学的にこの研究領域に関与していく必要があり、併せてそれらを俯瞰的に見ることが出来るインタープリタ的な人材の育成も課題になると思われ、本領域に興味を持ってくれる人の参入を期待したい。

当日は、産官学それぞれから多数のご参加を頂き、109 名の方に議論に加わっていただくことが出来、非常に実りある会となった。今後も、継続的にこのようなテーマをあらゆる角度から扱っていきたいと考えている。

(文責：前田和哉)

第 386 回 CBI 学会 講演会

「創薬を支援する構造データベースの応用」

日時：2017 年 7 月 21 日 (金) 13:10-17:45

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター (CIC 田町) 1 階 国際会議室 (東京都港区芝浦 3-3-6)

世話人：新美 達也 (アステラス製薬株式会社)、徳良 誠健 (大正製薬株式会社)、狩野 敦 (株式会社モルシス)

プログラム：

- (1) 13:10-13:20 開催の挨拶
- (2) 13:20-14:00 「Protein Data Bank の新しいデータフォーマット、登録システムと構造評価ツール」
中川 敦史 (大阪大学 蛋白質研究所)
- (3) 14:00-14:40 「タンパク質立体構造の比較とデータベース」
水口 賢司 (医薬基盤・健康・栄養研究所)
- (4) 15:00-15:30 "Utilizing Small Molecule Crystal Structure Data to Improve Drug Design"
Dr. Paul Sanschagrin (The Cambridge Crystallographic Data Centre)

- (5) 15:30-16:00 “Structural informatics studies of pharmaceutical molecules;
application to solid form selection”
Dr. Shyam Vyas (The Cambridge Crystallographic Data Centre)
- (6) 16:15-16:35 「構造生命科学データクラウド VaProS とその適用事例」
由良 敬 (お茶の水女子大学 生命情報学教育研究センター)
- (7) 16:55-17:35 「シミュレーションで得た分子構造のデータベース化」
平山 令明 (東海大学 先進生命科学研究所)
- (8) 17:35-17:45 総合討論

開催報告：

構造データは、実験的に構造決定すること自体が困難な時代からデータベース化され、また、そのデータベースから新たな知見を得て様々な構造データベースが構築されてきました。それらは、ゲノム情報や化合物情報と統合されながら、今日、ビッグデータ解析へと発展を続けています。

今回の研究講演会では、構造解析とデータベース構築の第一線でご活躍されている先生方に、生体高分子から低分子まで、そして、分子シミュレーションによる構造データを含めて、データベースの構築からその応用について講演して頂きました。

まず、中川敦史先生に、PDB における生体高分子の構造データの登録状況について解説して頂き、PDB の維持・管理に向けた活動として、新規データフォーマット、登録システムの自動化、構造評価ツールの拡張について紹介して頂きました。データフォーマットについては、現状の問題点に照らし合わせて詳しく説明して頂きました。

次に、水口賢司先生には、1次レポジトリとしてのPDBから派生した様々なデータベースについて解説して頂き、水口先生が開発・公開されている統合型の創薬ターゲット・データベースのTargetMineについて化合物の相互作用部位の探索機能を中心に紹介して頂きました。



中川敦史先生



水口賢司先生



Paul Sanschagrın 先生



Shyam Vyas 先生



由良敬先生



平山 令明先生

海外からは CCDC の 2 名のサイエンティスト、Dr. Paul Sanschagrín と Dr. Shyam Vyas を招聘し、低分子結晶構造データベースの応用例について講演して頂きました。CCDC には 90 万件を超える化合物データが登録されており、有機化合物の約半数がドラッグ・ライクな化合物です。結晶構造に則した分子構造の改変の具体例と、化合物の配座や結晶多形と物性値の関係について紹介して頂きました。

由良敬先生には、ビッグデータからの新しい知見を見出す方法について講演して頂きました。構造生命科学における情報基盤として構築されたデータクラウド VaProS の利用例として、疾患名からキーワードの解析、ゲノム情報や構造情報の探索、そして、原因となる蛋白質の変異部位の立体構造の解析までできることを示して頂きました。

最後に、平山令明先生には、今後、シミュレーションの精度の向上と応用範囲の拡大が見込まれる中で、シミュレーションで得た構造データのデータベース化の必要性について講演して頂きました。会場からもデータベース化に前向きな意見が出され、今後 CBI でのデータベース化に向けた活動が期待されます。

構造データベースについて、その歴史や背景についても興味深いお話を聞くことができ、また、分子シミュレーションも含めて今後も増え続ける構造データへの取り組みについても限られた時間でしたが討論することができました。講演頂きました先生方には、この場をお借りして深くお礼申し上げます。



今後の講演会 予定

第 387 回 CBI 学会講演会

「薬物 - 標的親和性計算の新潮流 ～古典 MD から量子 MD へ～」

日時：2017 年 9 月 1 日（金）13:00-17:50

場所：グランフロント大阪ナレッジキャピタル 北館タワー C 9 階 VisLab OSAKA

世話人：木下 誉富（大阪府立大学）、山崎 一人（大日本住友製薬株式会社）、
田中 成典（神戸大学）

第 388 回 CBI 学会講演会

「創薬・ヘルスケア応用に向けた腸内細菌の最新動向」

日時：2017 年 11 月 10 日（金）13:30-17:30

場所：東京工業大学キャンパスイノベーションセンター（CIC 田町）

1 階 国際会議室（東京都港区芝浦 3-3-6）

世話人：中嶋 久士（興和株式会社）、田上 宇乃（味の素株式会社）、
佐藤 秀行（オープンアイ・ジャパン株式会社）

委員会報告

【創薬研究会運営委員会】

第 28 回創薬研究会運営委員会

日時：2017 年 5 月 15 日 (火) 15:00-17:00

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 508 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：粟飯原 一弘 (Meiji Seika ファルマ)、石川 誠 (日産化学工業)、江頭 啓 (小野薬品工業)、岡田 興昌 (田辺三菱製薬)、岡部 隆義 (東京大学)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦 (モルシス)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、佐藤 秀行 (オープンアイ・ジャパン)、嶋田 朋嘉 (帝人ファーマ)、高土居 雅法 (杏林製薬)、谷村 直樹 (みずほ情報総研)、徳良 誠健 (大正製薬)、中嶋 久士 (興和)、新美 達也 (アステラス製薬)、増田 友秀 (東レ)、松本 俊二 (富士通)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：嶋根 みゆき (中外製薬)、田上 宇乃 (味の素)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)、田中 博 (東北大学 ToMMo)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)

- 議題：(1) 今後の講演会企画の進め方について
(2) 特別講演 (運営委員+講師のみのクローズドセミナー) 企画について
(3) 若手企画について
(4) 法人会員各社 2 人目の委員の参加のご要望について
(5) 講演会企画の資金について

資料：(1) 創薬研究会の運営方針 メモ (2017 年 4 月 28 日)

第 29 回創薬研究会運営委員会

日時：2017 年 5 月 25 日 (金) 10:30-12:00

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 2階多目的室 4 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：粟飯原 一弘 (Meiji Seika ファルマ)、石川 誠 (日産化学工業)、江頭 啓 (小野薬品工業)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦 (モルシス)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、嶋田 朋嘉 (帝人ファーマ)、嶋根 みゆき (中外製薬)、高土居 雅法 (杏林製薬)、田上 宇乃 (味の素)、谷村 直樹 (みずほ情報総研)、徳良 誠健 (大正製薬)、中嶋 久士 (興和)、増田 友秀 (東レ)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：岡田 興昌 (田辺三菱製薬)、岡部 隆義 (東京大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、佐藤 秀行 (オープンアイ・ジャパン)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)、田中 博 (東北大学 ToMMo)、新美 達也 (アステラス製薬)、本間 光貴 (理化学研究所)、松本 俊二 (富士通)、水間 俊 (松山大学)

- 議題：(1) Group1, 2 の主題決定
(2) 特別講演 (運営委員+講師のみのクローズドセミナー) 企画について

資料：(1) 研究講演会企画案 (2017 年 5 月 15 日)

第 30 回創薬研究会運営委員会

日時：2017 年 7 月 21 日 (金) 10:00-11:00

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 2階多目的室 4 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：栗飯原 一弘 (Meiji Seika ファルマ)、石川 誠 (日産化学工業)、江頭 啓 (小野薬品工業)、岡田 興昌 (田辺三菱製薬)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、狩野 敦 (モルシス)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、相良 武 (大鵬薬品工業)、佐藤 秀行 (オープンアイ・ジャパン)、嶋田 朋嘉 (帝人ファーマ)、高土居 雅法 (杏林製薬)、高橋 一敏 (味の素)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)、谷村 直樹 (みずほ情報総研)、徳良 誠健 (大正製薬)、中嶋 久士 (興和)、新美 達也 (アステラス製薬)、増田 友秀 (東レ)、松本 俊二 (富士通)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、小澤 陽子 (CBI 学会事務局)、塩塚 真理 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：岡部 隆義 (東京大学)、嶋根 みゆき (中外製薬)、田中 博 (東北大学 ToMMo)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学)

議題：(1) 報告事項

①窓口担当者の変更

(2) 講演会について

① Group 1 講演会 (2017 年 2 月予定) 企画の進捗

② Group 2 講演会 (2017 年 3 月予定) 企画の進捗

③ Group 3 講演会 (2017 年 5 月予定) 企画の進捗

④ LINC 報告会 企画の進捗

⑤ 各社 2 人目の委員の登録について

⑥ 次回 CBI 創薬研究会運営委員会開催予定について

資料：(1) Group 1 の講演会企画について (7/21 江頭、緑川、岡田)

(2) Group 2 候補者 (7/21 相良)



【執行部会】

第 31 回執行部会

日時：2017 年 6 月 28 日 (水) 18:15-20:00

場所：AP西新宿 F 会議室 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 5 階)

出席者 (敬称略)：石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援、電話)、石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、岡部 隆義 (東京大学創薬機構)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、河合 隆利 (エーザイ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)、田中 成典 (神戸大学、スカイプ)、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)、水間 俊 (松山大学、スカイプ)、小澤 陽子 (事務局)

欠席者 (敬称略)：相良 武 (大鵬薬品工業)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、田中 博 (東北メディカルメガバンク機構/東京医科歯科大学)、茂榎 薫 (順天堂大学)

議題：(1) 報告事項

① 2017 年度第 1 回 CBI 学会研究推進委員会報告

② 第 2 回理研・製薬協連携フォーラム「創薬専用 MD シミュレータの産学共同開発」の案内配信について

③ 新学術領域「分子ロボティクス」最終公開シンポジウム案内配信について

(2) 討議事項

① 2017 年大会について

② 2018 年大会について

③ 若手の会について

- 資料：(1) 2017 年度第1回CBI学会研究推進委員会報告書
(2) 2017 大会出展収入の現状
(3) 2017 大会出展明細
(4) 2017 大会学生アルバイトの状況

第 32 回執行部会

日時：2017 年 7 月 25 日 (水) 18:15-27:40

場所：AP 西新宿 G 会議室 (東京都新宿区西新宿 7-2-4 新宿喜楓ビル 5 階)

出席者 (敬称略)：石田 誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)、片倉 晋一 (第一三共 RD ノバーレ)、河合 隆利 (エーザイ)、長谷明彦 (東京工業大学)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオピア)、多田 幸雄 (CBI 学会事務局)、田中 博 (東北メディカルメガバンク機構/東京医科歯科大学)、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)、茂柳 薫 (順天堂大学)、小澤 陽子 (事務局)

欠席者 (敬称略)：石川 智久 (NPO 法人地方再興・個別化医療支援)、相良 武 (大鵬薬品工業)、田中 成典 (神戸大学)、水間 俊 (松山大学)

議題：(1) 報告事項

- ① 遠隔インタラクティブ講義案内の配信
- ② 日本バイオインフォマティクス学会 第 20 回創薬インフォマティクス研究会「GPCR 研究の新展開：その機能および功労の理解と創薬への応用」(9 月 26 日) の案内配信
- ③ 個別化医療研究会の副主査の件
- ④ 第 5 回個別化医療研究会の報告書

(2) 討議事項

- ① 2017 年大会について
- ② 2018 年大会について
- ③ Heifetz 博士の講演について

- 資料：(1) 第 5 回個別化医療研究会報告
(2) 2017 大会出展収入の現状
(3) 大会プログラム (座長補佐決定用)



【関西部会】

第 13 回関西部会運営委員会

日時：2017 年 5 月 12 日 (金) 10:00-12:00

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル (大阪市北区大深町 3-1)

北館タワー C 9 階 都市活力研究所 セミナールーム

出席者 (敬称略)：小長谷 明彦 (東工大)、六嶋 正知 (塩野義製薬)、山崎 一人 (大日本住友製薬)、水口 賢司 (医薬基盤研)、木下 誉富 (大阪府立大)、坂田 恒昭 (関西副部会長、大阪大、塩野義製薬)、田口 隆久 (情報通信研究機構)、志水 隆一 (都市活力研究所)、中嶋 久士 (興和)、鶴田 宏樹 (神戸大)、田中 成典 (関西部会長、神戸大)、牛尾 (書記、神戸大)

欠席者 (敬称略)：森 浩禎 (奈良先端大)、森 一郎 (神戸大)、奥野 恭史 (京都大)、岡田 随象 (大阪大)

- 議題：(1) 次回 (2017 年 9 月 1 日 (金)) の CBI 学会関西部会講演会について
(2) 次々回以降の講演会の開催
(3) 今後の企画・運営、その他

CBI 学会誌 第 5 卷 第 3 号

2017 年 8 月 31 日 発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 藤田 真澄

塩塚 真理 牛尾 律子 小宮山 直美

発行：CBI 学会

本著作物の著作権は著者にあり、CBI 学会は、本著作物に関する
冊子および電子媒体による複製、配布、改変、再出版の権利を持つ。

