

CBI学会誌



第 11 卷第 1 号

2023 年 3 月 1 日発行

巻頭言

分子生態学のススメ — 持続可能な循環型社会の基盤科学に向けて —

山村 雅幸

東京工業大学 情報理工学院

1950～60年代環境運動の萌芽期に、生態学者たちによって優れた啓蒙書が世に出ました^{*1}。そこに書かれた警告と提言はいまだに意味を持ち続けています。地球規模の気候変動は、もはや誰の目にも明らかです。にもかかわらず、豊かさを求めて環境破壊は止まず、覇権をかけて戦争まで起こる始末です。持続可能な社会構築に向けて、我々科学者には何ができるのでしょうか？

この60～70年間に、分子生物学・ゲノム科学の勃興により生命科学は大きな変化を遂げました。生態学では、生物個体を一匹ずつ肉眼で数えるフィールドワークに加えて、発展著しい生命関連分子計測技術と、遺伝子とその分子生物学的機能を調べるゲノム情報学の助けを得ることができるようになりました。生態学自体でも、個体同士の食う／食われる関係以外に、多様な物質・エネルギー循環を伴うダイナミックで全体的・複雑システム的な見方が取られるようになってきました^{*2, *3}。

私たちは、持続可能な社会とは、スーパーテクノロジーで一発起死回生させるような荒業ではなく、健康な生態系に見られる生命のダイナミックで多様な物質・エネルギー循環に倣って設計・維持されるべきであると考えます。そこでは、肉眼で見えるレベルではなく多様な分子を直接計測し、生態系に参加する全生物から大量に得られるゲノム情報により生態系の健康状態を診断します。そして、無差別殺戮の農薬や海洋汚染につながる化学肥料の過剰投与などの乱暴な手段ではなく、やはり分子レベルできめ細かく状態を整える生態系の微調整（コンディショニング）を行うことになるでしょう。そのためには、これまでの生態学とは異なる基盤科学が必要とされるはずで、分子に基礎を置く生態学を、従来の生態学と区別して分子生態学と呼びます。キーワードのみで恐縮ですが、観測にはメタゲノムやプロテオミクスのような分子計測技術が応用できます。計算にはもちろん現代の人工知能・データサイエンスが有効です。コンディショニングにはDNA コンピューティング、分子ロボティクス、ソフトマターなどが力を発揮するでしょう。

東京工業大学では上で述べたコンセプトの実現に向けて部局横断的な組織として循環共生圏研究推進体を立ち上げ、オンラインワークショップや市民対話の活動を続けています^{*4}。CBI 学会には、設立以来新しいコンセプトを取り上げることに寛容な伝統があります。上述のキーワードの多くはどこかで見たことがあるのではないのでしょうか。生物学が分子生物学となって大きな変容を遂げたように、生態学が分子生態学となることで現代的な課題により役立つ変化をもたらすでしょう。持続可能な社会構築に向けて、我々に何ができるか一緒に考えてゆきませんか。

参考書

- *1 例えば、チャールズ・エルトン：侵略の生態学（思索社、原書 1958）、レイチェル・カーソン：沈黙の春（新潮文庫、原書 1962）。
- *2 生物間の関わりに焦点、ペーター・ヴォールレーベン：樹木たちの知られざる生活（早川書房、翻訳 2018）、デイヴィッド・ソルト：レジリエンス思考（みすず書房、翻訳 2020）。
- *3 微生物の働きに焦点、デイヴィッド・モントゴメリー：土と内臓（築地書館、翻訳 2016）、同じくモントゴメリー：土・牛・微生物（築地書館、翻訳 2018）
- *4 <https://symbiotic-ecosystems.info/>

目次

(1) 巻頭言 「分子生態学のススメー持続可能な循環型社会の基盤科学に向けてー」 山村 雅幸 (東京工業大学 情報理工学院)	1
(2) ホットトピックス「Q-raKtion : 生物活性データポイントをキュレーションするための 半自動 KNIME ワークフロー」の紹介 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	3
(3) CBI ジャーナル便り (26)	5
(4) CBI 研究機構便り 次世代モダリティ研究所 第 4 回次世代モダリティセミナー 坂田 恒昭 (次世代モダリティ研究所所長・大阪大学共創機構)	6
(5) 若手の会コラム第 6 回 シリーズ企画「若手の会キャリア (第 4 回)」 「私のキャリアパス紹介」～意図的にキャリアを変更する： 研究、営業、事業開発を経て、投資と企業経営へ～ 中村 慎吾 (株式会社 Veritas In Silico)	8
(6) 講演会報告・予告	15
(7) 委員会報告	19
(8) 編集後記	24

Hot!!!

TOPICS

～最新文献の紹介

「Q-raKtion : 生物活性データポイントをキュレーションするための
半自動 KNIME ワークフロー」の紹介

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

Palazzotti, D.; Fiorelli, M.; Sabatini, S.; Massari, S.; Barreca, M. L.; et al. Q-raKtion: A Semiautomated KNIME Workflow for Bioactivity Data Points Curation. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2022**, *62*, 6309–6315.
<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c01199>

従来の創薬プロジェクトで、化合物の化学構造や生物活性、そして物理化学的な特性といった膨大なデータが生成されている。このような膨大な情報を有効的に活用することを目指し、PubChem や ChEMBL といったオープンデータベースを介したデータの共有化が活発化している。これらは構造活性相関などのモデル構築に重要な学習データとなりえるが、異なるデータソースから取得したデータを統合して活用する際には注意点がある。

一点目として、各データベースにはそれぞれの目的があり、収集するデータの種類と詳細度が異なっていることがある。Isigkeit らの研究では、複数のデータベースに格納されていた化合物は 40% 以下であり、全てのデータベースに格納されていた化合物は 1% にも満たなかったという報告がされている。このことから、データは散財されており、網羅的にデータを収集するためには異なるデータベースを活用することが不可欠であると考えられる。二点目として、複数のデータベースでは統一性や一貫性が欠けることがある。そのため、複数データベースから収集したデータを活用する際には、データポイントの形式やアノテーションを確認し、「データキュレーション」という精査する作業を行うことが重要となる。

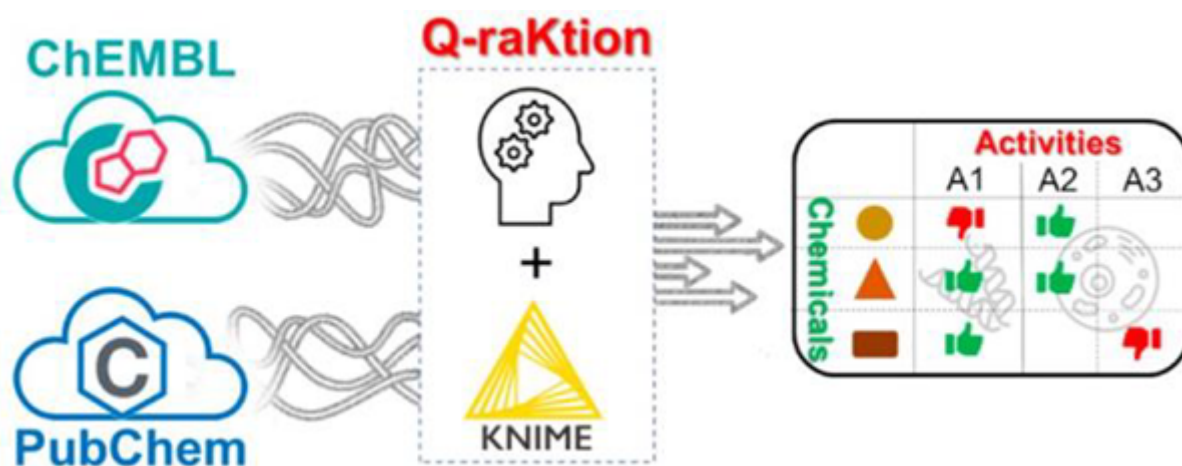
そのような背景の元で、近年は化学構造をキュレーションするための様々な自動化パイプラインが発表されている。しかしこれらのほとんどは、計算科学者でなければ再現が難しいという問題がある。そこで筆者らは KNIME を用いて、非計算科学者であっても、PubChem と ChEMBL の情報を半自動的に、そして効率的に集約するためのワークフロー Q-reKtion の開発を行った。その Q-reKtion は、以下の 4 つのステップで構成されている。

1. 入力データの読み込み : PubChem と ChEMBL から特定の疾患に対して試験された化合物データをダウンロードして読み込む。
2. バイオアッセイオントロジーのキュレーション : 読み込んだデータを、標的ベースと細胞ベースのどちらで生成されたか区別してクラス分けを行う。

3. 活性データのキュレーション：異なる活性値の比較と最適値の選択、信頼度の割り当て、全ての活性値をまとめる行の設定を行う。
4. データの統合：同じ化合物において ChEMBL 用の統合データセットと PubChem 用の統合データセットを用意し、これらをまとめた包括的なデータセットを構築する。

筆者らは Q-reKtion を使い、癌の治療標的として知られるセリン・スレオニンタンパク質キナーゼ ARK1 の生物活性試験データの統合例を示している。その結果、ChEMBL と PubChem では取り込まれたデータポイント数が大きく異なっていた。そのうち、ほとんどの化合物が 1 つの活性値しか持たず、2 つ以上を持つ化合物の数は同程度であることが分かった（PubChem では 362293 の化合物のうち複数の活性値を持つのは 1936 件、ChEMBL では 8792 化合物のうち 1538 件）。また、標的ベースと細胞ベースの活性値の両方を格納しているデータは少なく、PubChem では 378 件、ChEMBL では 350 件であることが分かった。最後に生物活性値の信頼度を計算し、信頼度の高いデータを保有するデータセットを作成し、公開している。

この論文では、無償で使える KNIME を使い、PubChem と ChEMBL に格納されている生物活性データを統合してデータセットを構築するワークフローとして Q-reKtion を発表した。KNIME を用いることで、特別な知識がなくても使用者の目的に合わせた設定ができる。他のシステムと組み合わせたワークフローにより、予測モデル構築に向けた質の高いデータセットの生成を開始することができる。



※ 図 は、原 著 TPalazzotti, D.; Fiorelli, M.; Sabatini, S.; Massari, S.; Barreca, M. L.; et al. Q-raKtion: A Semiautomated KNIME Workflow for Bioactivity Data Points Curation. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2022**, *62*, 6309–6315.

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c01199> からの転載

原著は Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International (CC BY-NC-ND 4.0)

著者が紹介する CBIJ 掲載論文

◆ opinion

Difficulties and prospects of data curation for ADME *in silico* modeling

ADME データのキュレーションにおける難しさと展望

江崎剛史¹、池田和由^{2,3}¹ 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² 理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター³ 慶應義塾大学薬学部

近年は創薬における研究開発費と時間を削減することを目指し、機械学習を始めとした人工知能を用いた予測が注目されている。高い精度で予測を行うためには膨大な実験データを分析することが必要となるが、多くの企業や大学の研究室で十分なデータを収集することは容易ではない。そこで、論文などから化合物の構造情報や実験値などを収集し、精査した上で格納・公開（キュレーション）している公共データベースの活用が有効となる。

体内に投与された薬物の挙動は、吸収 (Absorption)、分布 (Distribution)、代謝 (Metabolism)、排泄 (Excretion) をまとめた ADME として、薬物動態の重要な研究テーマとなっている。これらは研究目的に応じた条件で実験値が得られるため、実験条件の精査が必要だが、実験条件のキュレーションは進んでいない。ADME 特性を予測するためのデータセットは実験の専門知識が必要とされる点が、実験条件のキュレーションが加速しない一因である。

実験条件は実験科学者の、データ分析は計算科学者の得意領域である。それぞれの研究者が協同してキュレーションを行ってデータセットを整備することが、将来的に「使える予測モデル」を構築するために重要である。

紹介：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)

2023 年 1 月 13 日公開

Chem-Bio Inform. J. 23 (2023) pp. 1-6.

<https://doi.org/10.1273/cbij.23.1>

CBI 研究機構便り

次世代モダリティ研究所 第 4 回次世代モダリティセミナー

令和 4 年 11 月 16 日 (水) ライフサイエンスハブウエスト / オンライン

CBI 研究機構 次世代モダリティ研究所 所長

坂田 恒昭 (大阪大学共創機構)



特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所では、関西医薬品協会及び LINK-J (一般社団法人ライフサイエンス・イノベーション・ネットワーク・ジャパン)、公益財団法人都市活力研究所と共催で、またバイオコミュニティ関西 (BioCK) の協力で、次世代のモダリティについての研究、製造の紹介や相互交流の場を提供することで、産学、産産連携などのオープンイノベーション推進を目指す次世代モダリティセミナーをシリーズで開催している。

今回の第 4 回次世代モダリティセミナー」では大阪大学大学院医学系研究科 血液・腫瘍内科学 / 大阪大学免疫フロンティア研究センター (IFReC) 免疫細胞治療学教授 保仙直毅氏から「血液がんに対するデザイナー免疫細胞療法」について、信州大学医学部小児医学教室 教授 中沢洋三氏から「アカデミアによる非ウイルス遺伝子改変 CAR-T 細胞の臨床開発」について、公益財団法人 神戸医療産業都市推進機構細胞療法研究開発センター センター長 医学博士 川真田伸氏から「CAR-T 細胞製剤の製造現場から見た遺伝子・細胞治療の課題と展望」

についてご講演いただいた。また、各講師のご講演後に特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所所長（大阪大学共創機構 特任教授）の坂田恒昭氏を座長としてパネルディスカッションを行った。

なお、当日の参加者は大阪会場で 20 社 22 人、オンライン配信登録者数は 457 社 931 人であった。

-- 記 --

日時：令和 4 年 11 月 16 日（水）14 時 00 分～16 時 15 分

大阪会場：ライフサイエンスハブウエスト

オンライン会場：ZOOM にてライブ配信

主催：関西医薬品協会、NPO 法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所、LINK-J（一般社団法人ライフサイエンス・イノベーション・ネットワーク・ジャパン）

プログラム：

14 時 00 分～14 時 10 分 「挨拶 / 次世代モダリティ研究所のご案内」

特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所所長
大阪大学共創機構 特任教授 坂田 恒昭 氏

14 時 10 分～14 時 15 分 「挨拶」

関西医薬品協会 理事長 國枝 卓 氏

14 時 15 分～14 時 40 分 「血液がんに対するデザイナー免疫細胞療法」

大阪大学大学院医学系研究科 血液・腫瘍内科学

大阪大学免疫フロンティア研究センター（IFReC）免疫細胞治療学 教授 保仙 直毅 氏

14 時 40 分～15 時 10 分 「アカデミアによる非ウイルス遺伝子改変 CAR-T 細胞の臨床開発」

信州大学医学部小児医学教室 教授 中沢 洋三 氏

15 時 10 分～15 時 40 分 「CAR-T 細胞製剤の製造現場から見た遺伝子・

細胞治療の課題と展望」

公益財団法人 神戸医療産業都市推進機構

細胞療法研究開発センター センター長 医学博士 川真田 伸 氏

15 時 45 分～16 時 15 分 「パネルディスカッション」

座長：特定非営利活動法人情報計算化学生物学会・CBI 研究機構・次世代モダリティ研究所所長、大阪大学共創機構 特任教授 坂田 恒昭氏

パネリスト：講師の先生方



CBI 若手の会コラム (第 6 回) シリーズ企画「若手の会キャリア (第 4 回)」

「私のキャリアパス紹介」

～意図的にキャリアを変更する：

研究、営業、事業開発を経て、投資と企業経営へ～

中村 慎吾

(株式会社 Veritas In Silico)

1. はじめに

私は現在、株式会社 Veritas In Silico というバイオテック企業（以下、VIS）の社長を務め、その会社の健全な成長のために日々努めているところです。そこに至るまでの間、アカデミアと産業界での研究、営業、事業開発、果てはベンチャーキャピタリストとしての投資から企業経営までたずさわってまいりました。正直、私の経歴が皆様の参考になるとは思えませんでしたし、むしろ参考にしてはいけないのではないかとすら思っておりましたが、このように私の経歴についてご説明するご機会をいただいたことをきっかけに見つめなおすことにいたしました。もしかすると、私が新たな分野・領域に足を踏み出す際の考え方などなら、参考にしていただける要素があるかもしれません。また、そう考えるなら、より科学研究に寄ったご説明が適切だろうと考えました。ここに提供させていただきますので、ご参考いただけますと幸いです。

2. これまでの軌跡

学位：2000 年 博士（有機化学） 名古屋大学工学研究科

経歴：

2000 年～ 2003 年 米国 Yale 大学 博士研究員（分子細胞発生生物学科）

2003 年～ 2011 年 武田薬品工業株式会社 主任研究員

2011 年 米国 Dow Chemical 社 営業部マネジャー（日本 / 韓国、医薬品添加物）

2011 年～ 2015 年 米国 Catalent 社 事業開発部長（アジア、バイオ医薬品生産）

2015 年～ 2017 年 株式会社産業革新機構 戦略投資ディレクター

2016 年～ 株式会社 Veritas In Silico 代表取締役社長

アカデミアで 3 分野の経験を積む

皆様は、大学への進学あるいはその際にどちらの学部を選ぶかについてどのようにお考えになりましたでしょうか。東京に住む私でしたが、親元を離れつつ金銭的負担が少ないようにと考え、祖母と同居すれば通える国立大学として名古屋大学を選びました。さらに、もともと生物学が得意であったこと、社会への貢献をコミットしているように感じられた「工学」への興味から、名古屋大学工学部に応用科学科から分かれて新設された生物機能工学科に入学しました。後からわかったのですが、父も名古屋大学の当時新設されたばかりの情報学科に進学していましたし、新たな学科に興味を覚えること自体も父親譲りだったようです。

大学在学時代の初期は、そんな父への対抗心から、専門課程の化学や生物学の勉強をそっこのけでコンピュータの勉強に取り組み、20 歳ごろに第一種情報処理技術者試験に合格していました。この時に、複数のコンピュータ言語を用いて、応用数学を数値的に解くなどの実用レベルのプログラムができるようになっていました。これは、

専門家の助けを借りなくとも、自分でも何をしたいかよくわからないままあやふやな状況から計算をかけることができるという意味で、後々大変役に立ちました。

一方、新設された生物機能工学科はまだあまりカリキュラム等が整備されておらず、私は少し場違いであると感じていました。4年生になるころ、大学院は別のところに進もうかとも考えました。当時興味があったのは、神経細胞の情報伝達の仕組みだったので、調べてみると名古屋大学理学部物理学科にそうした研究室（木島 博正教授）がありました。一方、研究室配属されるというご縁で有機化学の研究（山本 尚教授）に触れますと、あまりに歯ごたえのある世界レベルの研究に強く惹かれました。どちらに進学したいか決め切れず、工学部生物機能工学科と、理学部物理学科の両方を受験し（正確には、理学部物理学科と工学部の試験日が同じだったので受験できず、代わりに理学部分子生物学科に合格すると1名だけ物理学科に転入できるという裏ワザを利用しました）、幸い両方から合格をいただきました。それでもどちらに進学するか決め切れなかったため、悩んだ末に両方の先生にご相談させていただき、公式には工学部で有機化学を学びつつ、非公式に（週に1日）物理学科で勉強させていただくことにしました。わがままを聞き届けてくださった両先生には本当に感謝しておりますし、なんでも交渉次第で何とか道は開けるといふ経験にもなったように思います。

大学院で主として行った有機化学は非常に奥が深く、一筋縄ではいかないことを痛感し、科学を突き詰めることに興味を持つようになりました。また、たまたま研究室がお金持ちだったので、強力なワークステーションが装備されていましたから、誰も使わないのをよいことに密度汎関数法での量子化学計算を用いた触媒設計にも取り組みました。大学院での研究時間のうち、毎週1日を物理学科で、同じくらいの時間を量子化学計算に使うこととなっていました。それでも、ホカゴトをやっているために本業である有機化学がおろそかになっていると言われたくないがために有機化学の研究も死ぬ気で行いました（最終学年においては、朝6時に研究室に行って、帰るのは朝2時と言う生活が続きました）。最初は生物学と全く関係のない純粋な触媒有機化学を研究していたのですが、気持ちが生物学にあるからかだんだんと生物学的な研究要素が自然に加わり、最後には、酵素にしかできない化学反応の典型例と言われていた、テルペン類を環化させて一反応で複数の不斉炭素を一挙に構築する「エン環化反応」を、バイオミメティック（生物を模倣した）反応として人工的に行うという研究になりました。非常に達成感のある仕事をできて、満足度も高まったのです。

しかしこの時、私は一つのことには気づき始めていました。有機化学の研究中に、あるテーマについて行き詰まり、これ以上やってもいい論文（アメリカ化学会誌級）にならないと感じてそのテーマを中断するということがありました。その後、1-2年たったころでしょうか、まさにそのテーマについて行き詰ったところまでほぼ同じ内容の論文が出たのです。この時に私が感じたのは、「論文にしておけばよかった」ではなく、「（あのテーマについて研究をまとめてくれて）よかった」でした。すなわち私には、研究者としておそらく必須の気質であろう、研究結果を誰よりも早く世の中に出したいという欲求が希薄なことに気付いたのでした。つまり研究者として向いていなかったのです。

ところが、大学院を終えるころ、「そろそろ研究なんてやめて、ビジネスをやるつもりなんだろうな」という父への（またしても）対抗心のため、更に研究に踏み込むことにしました。そこで取り組もうと考えたのは核酸についての分子生物学を学びたいということでした。実は、移り気な私は大学院の入試を終えたころ、購読していた Nature 誌に衝撃的な論文をいくつか見つけました。それは、生体内で情報を保持するための生体高分子であ



る RNA や DNA を用いて、触媒機能を持たせたリボザイムあるいはデオキシリボザイムというものが作成できるということでした。有機化学で触媒を作ろうとしていた私にはあまりに強い衝撃で、すぐにでもその分野に飛び込みたいと思ったところ、山本教授に「先に基礎的な化学を学んでからでも遅くないよ。むしろ近道だよ」と諭されていたのです。いよいよ有機化学で博士号を取るところまで到達したので、博士研究員ではその分野に飛び込む覚悟でした。その分野の超若手研究者として米国 Yale 大学分子細胞発生生物学科の Breaker 教授にコンタクトし了承を得て、博士研究員としてのキャリアをスタートさせました。そこで研究を始めてすぐに、研究所内でリボスイッチという機構が発見されました。mRNA 上の部分構造が、たんぱく質の関与なしに低分子等と相互作用して遺伝子発現が制御されるというその系もまた非常に衝撃的でした。意図してかどうかわかりませんがここでの研究は、大量の論文を調査するインフォマティクスの専門家、化学合成の専門家（私）、インビトロでの構造評価をする専門家、細胞実験の専門家が、互いに垣根なく議論し実験することで急速な発展を遂げました。各専門家は全員が基本的にどの領域の研究もすべて自分でできるレベルまで理解したうえで、分業を行っていました。この複数の分野にまたがる研究を、全員が複数の分野を専門的にこなせるうえでの分業が行われていたわけです。お互いの専門性が重なり合った研究体制の速さと頑健さはここで身をもって体験し、現在の VIS にも再現されようとしています。

このあたりで、父が突然がんになりそのまま亡くなりました。また、友人の配偶者も脳腫瘍で亡くなりました。私は目が覚めたように、医薬品を作ることに使命感を感じました。やるなら本気でやらないといけません。いくつかの製薬会社の門をたたいたところ、縁あって武田薬品に入社することになりました。

産業界で医薬品を作るということを肌で知る

武田薬品に入ってみますと、それぞれの領域に極めて優秀な専門家が多数活躍なさっており、私のような3つの研究領域を知っているような中途半端な研究者は、それぞれの専門性でまったく太刀打ちできないことを痛感しました。それではいけないと頭を絞りに絞って、RNA の様子をよく知ったうえで、コンピュータの解析によって創薬の対象となる部位を発見し、低分子化合物で医薬品を作るというコンセプト「mRNA に対する低分子創薬」を思いつきました。それは、全ヒトゲノム（より正確には mRNA 配列）についてインフォマティクスによって部分構造を解析し、低分子創薬可能な箇所を網羅的に発見したうえで、めばしいものについては全て低分子医薬品を創出してしまおうという我ながら野心的なものでした。幸いなことにこのコンセプトは認可され、2004 年春に武田の中のいわば社内ベンチャー企業のような形でプロジェクトを開始しました。現在でこそ、mRNA に対する低分子創薬は一定の可能性があることと認知されていますが、今より 20 年ほど前にこのプロジェクトの将来性を理解いただいた柔軟性には非常に感謝しています。当時はヒトゲノムが無料で公開されていない反面、武田薬品の社内では、莫大な年間使用料を支払って Celera 社のヒトゲノムデータが使用できたことから、自由に全ゲノム計算ができる環境でした。つまり非常に先進的なこの研究は、アカデミアでこそむしろ行えず、製薬会社でなければできないという稀有な状況でした。加えて、私がアカデミアにすら基礎理論がないアイデアについて、それを統計力学の分野から理論を借りてきて生物学に当てはめて解析するといういわば突飛な方法で実現するにあたって、誰を納得させる必要もなく試行錯誤的に計算を行いながら基礎理論を構築するということは、自分でコーディングできなければできなかったとは思いますが、いろんなことに恵まれてプロジェクトがスタートいたしました。結果として、「mRNA に対する低分子創薬」についてのコンセプトを含んだビジネスモデル特許を世界で初めて出すことにつながりました。

15 年くらいはかかるだろうと思っていた本研究「mRNA に対する低分子創薬」プロジェクトですが、会社の方針が転換されて長い期間がかかるプロジェクトから撤退するということになり、7 年ほどたった 2011 年に中止されることが決まりました。会社の都合でプロジェクトが消えるのは残念ですが仕方のないところです。ただし、それを機会にもう一度私は自分が何をしたかったのかを見つめなおしました。その時気づいたのは、私は医薬品を社会に届けるために製薬会社の研究所に入ったのに、製薬会社の研究所では医薬品はなかなか創出されず、時には一つの医薬品の創出にもかかわることがないままご定年退職なさる方もいらっしゃるという現実でした。もちろんそうした直接医薬品の創出にかかわらない方も、何らかの形で会社やその医薬品の創出に貢献なさっているわけですが、私の「医薬品を社会に届ける」気持ちからはより直接的にかかわりたいと思ったわけです。そこでむしろ、医薬品の研究開発ではなく医薬品が市場に出るところについて貢献できる方法はないかと考えていた

ところ、当時化学工業の領域で、独 BASF と世界最大の座を争っていた米 Dow Chemical 社が、営業未経験の私を、医薬品添加物を売る営業部のマネジャー（日本・韓国担当）として採用したいというのです。これは面白いと、私は 2011 年の春に米 Dow Chemical 社の営業部に転職しました。

研究職を離れる

営業部に入っただけで気づいたことは、営業という活動においてはよい製品があれば売れるというものでもなく、営業活動のための理論と実践があるということでした。研究職同様の深遠な世界がそこに広がっていたのです。なにしろ、Dow Chemical で私が売っていた製品は、日本製の同等品に比べて品質が悪くそれでいて値段が高いのですが（！）、それでも世界で最も売れているんです（というか、売んですが）。ここでの仕事を通じて、また米国本社・工場（町全体が Dow で占められている）にも中国支社（オフィス内にエスカレーターがあるほど巨大で先進的）にも邪魔して、完全にグローバル化した会社というものがどういう会社になるかを体感できました。ただ、自分が時間を使って学んだ科学という分野からあまりに遠くに来てしまったので、もう少し科学に近い世界に戻ろうと思いました。

いずれにせよ、この Dow Chemical で痛感したのは、自ら望んだこととはいえ、自分が青春をかけた科学分野から離れるということについては、それなりの精神的なショック（＝喪失体験）があるということでした。会社にお勤めになる方には、ある時期に研究職から別の仕事にアサインされる時があるでしょう。研究所の中にも、研究を実際に自分で行うという仕事から、部下をマネジメントする仕事に変わることがあるでしょう。幸運にもずっと研究を続けることができた方でさえ、定年退職などの際には必ず研究から離れる時期が来ます。つまりいかなる形であっても、大学で学んでいる皆さんであっても研究という仕事から離れることがあり、その際に少なからず精神的なショックを受けるということは覚悟しておいてください。それを少しでも和らげることができるとしたら、研究以外にも重要な仕事や生活があるということを知っておくことであったり、自分の適性を知っておくことでもあると思うのです。

さて、少し科学に近い仕事に変わりたいと思ったころ、ちょうど営業職と研究職の間にあたるような仕事をオファーしてくれる企業が現れました。米 Catalent 社という世界最大手の医薬品受託製造会社が、アジア全域でのバイオ医薬品製造に関する事業立ち上げのため、事業開発の部長（ディレクター）を探していたのです。私は 2011 年冬に、米国採用の日本駐在という形でアメリカからアジアへグローバル化していこうというこの会社で働くことになりました。この事業開発職は新規の顧客開拓でもありつつ、そうした新規顧客のニーズが極めて科学的にとがっているため、それに応える必要がある非常に面白いものでありました。

こうして武田という日本からグローバル化していく会社、Dow という完全にグローバル化した会社、Catalent というアメリカからアジアにグローバル化していく会社を体験して痛感したことは数多いです。例えば、Dow という会社では英語が話せることは当然でして、上司や部下、同僚に外国人がいるのも当然、経費処理や IT のサポートなどのサポート部門はそもそも世界に 1 か所に集中させているので、何かあったらすぐに電話会議で海外と話をすることになるわけです。しかし、興味深いことに帰国子女は基本的に採用されない様子でした。つまり、Dow にとって日本市場を攻める場合には日本をよく知る人が必要なので、帰国子女のように海外を知っているけど日本を知らない人は必要ないんですね。しかし、もっと英語が大変なのは、Dow ではなく Catalent でした。なにしろ、グローバル化していないのでアメリカの常識で物事が動くのです。ヨーロッパの連中と私はそれでよく困りました。また、何となく会議があつて何となく結論がなく終わるような日本的（？）無駄になりそうな会議というものが、グローバル企業にもあることがわかりました。多分、私がこういった企業に重宝がられたのは、



そうした無駄になりそうな会議が終わる際に、「今回の結論は何だ？こっちがあんたらの言っていることが半分しかわからないのは、あんたらが内輪でしか通じないような議論をしているからだ。さあ、何が決まって明日からどうするのかまとめよう」と言える人間だったからのように思います。私がアジアを取りしきる責任がある場合、結論が出ない会議は意味がないし、アジアに関する会議からアウトプットを出す責任が私にあるので、そこをリードできることが求められたのだと思います。本国採用で日本に駐在する場合、彼らから見て放っておいても何とかしてくれる人材が求められるのだと思います。

いずれにせよ、Catalent では楽しくやりがいのある仕事をしていましたが、そこで一つの事件が起こります。Catalent が NYSE にいきなり上場したのです。うすうす気づいていたのですが、Catalent は、世界最大級の投資ファンド Blackstone が保有していて、上場させることを意図した経営がなされていたのです。医薬品の受託製造は、医薬品関連の規制が緩くなったために産業として盛り上がり始めていました。一方、機械・自動車・電子部品・半導体等についての受託製造は当然世界で 40 年以上前から行われており、ビジネスとしてどうしたら成功するかがもうわかっています。そこで Blackstone は、医薬品の受託製造について通常の製造業の受託製造の成功の方程式を持ち込んで、一気に世界最大の企業を作り上げようとしたのです。頭いいですね。「いやーファンドって面白いな、そんな仕事があるんだな」などと私がいろいろと周りに語っているうちに、当時日本最大級である総額 2 兆円の投資能力を持つ投資ファンドであった株式会社産業革新機構(INCJ)からお声がけいただいて、2015 年に投資ディレクターとして金融業界の仲間に入れていただきました。

投資家として、金融業の目線を学ぶ

INCJ では、金融の常識や実務から会社経営までを徹底的に実地訓練を積んだ形になりました。投資にはいくつかの分野がありますが、その中でもベンチャーキャピタル投資 (VC) についての投資を行いました。いわゆる、ベンチャーキャピタリストになったわけです。INCJ は半官半民のファンドでして公の意味合いも強かったため、アカデミア等から持ち込まれる案件も数多く、初期の案件も含めて非常にたくさんのバイオテック投資案件を詳細に拝見することができ、目が肥えました。加えて、当時の INCJ は経営陣の方針で、同僚たちが実行する様々な投資案件からの学びが共有されておりました。私は、バイオテック以外の案件や VC 投資だけに限らない、質量ともに最高級の投資の実際について (成功事例だけでなく失敗事例についても) 触れることができました (特にシャープの買収、日産自動車による三菱自動車の買収の際に、どういった論点がありどういった実務がなされるのかなどは非常に得難い勉強になりました)。加えて、INCJ では投資するだけではなく、ハンズオンの名のもとに投資先に実際に取締役として加わり会社経営にも携わることが求められていました。私も実際に複数のバイオテック企業の取締役として企業経営に参加することにより、会社経営とはどういうことかについても実経験を積むことができました。何より尊かったのは、投資をする側のロジックや判断基準について、そのロジックを使う側として実体験することができたということです。

こうして金融業界での経験を積むにつれて、自然に一つの考えが頭に浮かんでくることになりました。それは、私がもともと武田薬品で社内ベンチャーとして行っていたプロジェクト「mRNA に対する低分子創薬」が、その成長可能性や科学の妥当性からみて他の案件よりずっと投資案件として好ましいということでした。しかも、当時の人類の科学力ではむつかしかったことが今はできるようになっておりますし、武田薬品でのいわば失敗経験からどのような科学的な手当てが必要なのかもわかりますし、どのようなビジネスモデルのバイオテック企業にしていけばいいかもわかります。資金調達には何が重要で何に気をつけねばならないかまで含めて資本政策に完全に落とし込みます。

私は、満を持して株式会社 Veritas In Silico を設立し、mRNA を標的とする創薬に取り組み、現在に至っています。

バイオテック企業の設立において何が重要か、経営するにあたって何が重要か、その成長の戦略はいかなるものであればよいか、それらだけで 1 冊の本が書ける内容です。ここではそこに踏み込みません。しかし VIS で仕事を大変よく分かったのは、やる気があり志を同じくする仲間がいかに重要かということでした。武田時代にも仲間に恵まれましたが、そのころから志を同じくする仲間、新たにこの分野に飛び込もうと考えた仲間、この仲間と一緒に最新の測定機器・研究技術を使うことで、武田時代には不可能であった数々の難問がクリアされました。おかげで、新たにビジネスモデル特許も出し直し、抜本的に精度・信頼性・頑健性が上がったため、

現在 VIS が持つプラットフォーム技術が出来上がりました。実際に、いくつかの製薬会社とパートナーシップを組み実際の創薬に取り組んでおり、直近では総額で数百億円になる契約もとれるようになってきました。

ここが私のキャリアの終着点ではないだろうとは思いますが、現在仲間とともに頑張っているところです。一体私が VIS をどのようにして経営しているかについては、もう少し会社が成長してからこそお話しすべきではと思いますので、はやる心を抑えて一旦ここで筆をおくことにいたします。

3. 生き抜くためのスキル

これがあれば必ず生き抜けるというスキルに私は出会ったことはありません。しかし、「生き抜ける＝お金をもらえる」と考えると、「社会がお金を出す対象というもの＝生き抜くためのスキル」になろうかと思えます。製薬業界においていえば、それはいつの世でもビジネスのために必要とされる（会社にとって収益に直結する）事業開発活動のスキルであり、医薬品を市場に出す際に必要とされる臨床開発のスキルであろうかと思えます。

一方、もっと漠とした言い方でよければ、2つのことが重要であると考えています。

一つは、2つ以上の分野について専門性を持った方がよいということです。私にとって「専門性」とは、単に聞きかじった程度ではなく、研究して論文を書くとかその仕事でお給与をもらえるというプロレベルに到達したことを言います。別の言い方をすると、その分野の奥深さに気付き試行錯誤を重ねる段階まで到達したことです。これは狭い意味では研究の領域のことを指しますし、より広い意味では研究職や営業職と言う職種を指しますし、更に広くは仕事をするキャリアと子育て等をするキャリアと言った生き方も指します。2つのことを専門とするということは、その境界領域を研究できるというような話だけにはつながりません。2つ以上の分野をある程度深くやれば、その他の（触ったことのない）分野の難しさも同様に相当程度むづかしいであろうことが想像できるようになります。これによりあらゆる人に対する敬意が生まれ、あらゆる人と共同して仕事に取り組む土壌となるのです。結局、チーム作業でしか大きな仕事はできませんので。

もう一つは（CBI 学会にいらっしゃる方には釈迦に説法だと思いますが）、コンピュータを使えるようになっておいた方がよいということです。これは、ソフトウェアを使えるという意味よりも、スマホを使いこなすという意味よりも、自分が計算したいと思うことを自分でさっさと計算させてしまえる程度にコンピュータを手足として使える（＝仕事に使えるレベルまで応用数学を理解し、プログラミングして計算させて実用できる）ようになっておいた方がよいということに近いです。あるいは、ソフトウェアをブラックボックスとして盲目的に使うのではなく、自分で改めて書けるほどに中身を理解したうえで使ったほうが良いということです。コンピュータは今後決して遅くならず、自分で思った通りのやり方で計算させられる人とそうでない人の差は増えこそしても減ることはありません。

どれも生き抜くためのスキルについて直接的なご説明ではありませんが、ご参考いただければと思います。



4. 若手研究者に伝えたいこと

「結局は、親からのアドバイスこそ大切」

正直なところ、私は自分のことをもう研究者だとは思っていませんし、そもそも研究者としての資質があったとも思いません。それでも先に書かせていただいた私の経歴から、研究者であったころの考え方、研究職から離れる際の考え方など、それぞれ皆さんが「キャリアパス」を考えるに何か少しでもご参考になるヒントをつかみ取っていただければと思います。

そのうえであえて申しますと、世の中的な風潮として、夢なるものを持つことが重要であるとか、あきらめなければ夢はかなうといった考えがありますが、私はこれらを非常に害のある考えだと思っています。夢なんて持つてなくてもいいし、変わっていくものです。固執しなければならぬ理由はありません。あきらめないことは必要条件かもしれませんが、十分条件ではないので、時にはあきらめることも必要です。私の現在をごらんになって夢がかなっていると思う方もいらっしゃるかもしれませんが、それはあなたがそう思っただけで私は全くそうとはばかりは思っていません。何しろ、私の興味は変わってきましたし今後もそうであろうと思うわけです。

ところで、私にとっては父への反発故のさまざまな人生の転機がありました。思い返せば今の私はビジネスをやっているわけで、結局は父の言っていたことが正しかったわけです。皆さんにとっても、親（あるいは親に相当するほど身近な方）こそがおそらくは最も気質も能力も環境も近い味方であることは間違いありません。であれば、すべて従う必要があるかは別問題ですが、こそばゆくとも（私からのアドバイスなどより）親からのアドバイスこそよくお聞きになった方がよいと思います。

ここまで乱文にお付き合いいただきましてありがとうございます。皆様のご活躍を祈念し、改めて筆をおこうと思います。



CBI 若手の会コラム担当通信

今回は株式会社 Veritas In Silico の中村慎吾先生に「私のキャリアパス～意図的にキャリアを変更する：研究、営業、事業開発を経て、投資と企業経営へ～」のタイトルで寄稿して頂きました。立場は違えど共通する考え方やターニングポイントがあり、今後のキャリアについて考えさせられる点が多いお話だと思いましたが、みなさまいかがでしたでしょうか。またぜひ経営者としてのお話もうかがう機会があればと思います。

読者の皆さまにおかれましては、是非新しい企画や感想などお寄せ下さい。また、一緒に企画して下さる仲間も募集中です（URL: <https://wakate.cbi-society.info/wakate/contact/>）。これからも読者のみなさまのご協力頂きながら、楽しく役に立つ企画を目指して参ります。



次号は 2023 年 6 月発行の第 2 号にて「CBI キャリア第 6 回」を掲載予定です。

若手の会コラム担当

熊澤啓子（帝人ファーマ株式会社）

渡邊博文（株式会社ウィズメーティス）

高橋 一敏（味の株式会社）

渡邊怜子（医薬基盤健康栄養研究所）

朴鐘旭（医薬基盤健康栄養研究所）

講演会 報告・予告

第 439 回 CBI 学会 講演会

「クラスターガウスニュートン法 (CGNM) の非線形薬物動態、薬物間相互作用、個人間変動、およびシステム薬理・毒性解析への応用：基礎と実践」

日時：2022 年 12 月 5 日 (月) 10:30 - 17:30

会場：日本教育会館 707 (東京都千代田区一ツ橋 2-6-2)

世話人：杉山 雄一(城西国際大学・イノベーションベース)、青木 康憲(Astrazeneca, Sweden, 城西国際大学) プログラム：

- (1) 10:30 - 11:20 キーノートレクチャー「クラスターガウスニュートン法 (CGNM) を使ってパラメータ推定可能性および信頼区間を統計的に示すには」
青木 康憲 (Astrazeneca, Sweden, 城西国際大学)
- (2) 11:20 - 12:00 「クラスターガウスニュートン法 (CGNM) の非線形薬物動態解析、相互作用解析への利用」
杉山 雄一 (城西国際大学・イノベーションベース)
- (3) 13:00 - 13:40 「クラスターガウスニュートン法 (CGNM) による middle-out PBPK モデリング & シミュレーション法の提案：シメプレビルの非線形薬物動態解析を例に」
年本 広太 (アステラス製薬株式会社)
- (4) 13:40 - 14:20 「数理モデルを構築する際にパラメータ許容範囲を設定する手法 (TEAPS) の開発」
本間 雅 (東京大学医学部附属病院薬剤部)
- (5) 14:20 - 15:00 「シグナル伝達経路あるいは物質代謝経路の挙動を記述するモデルに関して、パラメータ値を決定する際の TEAPS 活用法の検討」
苅谷 嘉顕 (東京大学医学部附属病院薬剤部)
- (6) 15:20 - 16:00 「Target mediated drug disposition (TMDD) による非線形 PK を示す薬物、5-alpha-reductase (5aR) 阻害剤の PBPK-PD モデル解析にクラスターガウスニュートン法 (CGNM) を用いた例」
岩城 雪 (ヤンセンファーマ株式会社)
- (7) 16:00 - 16:40 「プロドラッグ型化合物 Selexipag および活性代謝物の薬物動態、DDI の解析：酵素、トランスポーターのインタープレイをクラスターガウスニュートン法 (CGNM) で解析する」
佐々木 佳寛 (日本新薬株式会社)
- (8) 16:40 - 17:30 総合討論

開催報告：

クラスター ガウス ニュートン法 (CGNM) に関する CBI ワークショップを開催するのは 2019 年以来 今回を含めて 3 回開催させていただいている。初めて CGNM に関するワークショップを開催して以来、薬物動態のモデルベースの分析を実施するための方法の応用と並行して方法論を開発してきた。CGNM に関する 3 回目のワークショップでは、CGNM がどのように適用され、薬物間相互作用 (DDI) などの特に困難な薬物動態に関する理解が深まるかに焦点を当てて開催した。薬物動態の領域を超えて複雑な数理モデル解析を議論することを目的として、定量的システム薬理学についてもご講演をいただいた。

最初に、青木が CGNM の簡単な紹介を行い、実験データのばらつきがどのように推定されたパラメータに影響を与えるかというパラメータ推定不確かさの推定の最近の手法開発を示した。bootstrap 法や profile likelihood 法を CGNM のアルゴリズムを使用すると簡単少ない計算時間で PBPK モデルに対して行えるようになった事を示した。また、それらのアルゴリズムの R での実装が CRAN で公開されていることも報告させていただいた (<https://cran.r-project.org/web/packages/CGNM>)。

次に、城西国際大学の杉山先生が CGNM を使った最新の解析例を報告をしてくださった。現在製薬企業でも注目を集めている、OATP に起因する薬物間相互作用を予測することに役立つ内因性化合物である CP-1 の PBPK モデル解析、OATP における trans-inhibition effect を組み込んだ PBPK モデル解析、そして複雑な非線形性を示すマラビロクスの PBPK モデル解析の 3 例を挙げてくださった。特に、印象に残ったのが、CGNM は非線形最小二乗問題の数値解法であるので、血中濃度の計測値とシミュレーション値の二乗の和 (SSR) を最小にするようなパラメータコンビネーションを複数見つけるが、SSR が最小であってもそれが必ずしもモデル解析にあたって求めたいパラメータコンビネーションではないということがこれらの例によって示されたことであった。

昼食を挟み、午後最初の講演はアステラス製薬の年本先生から、シメプレビルの CGNM を使った PBPK モデル解析についてご講演をいただいた。このモデル解析でも、血中濃度の計測値とシミュレーション値の二乗の和が最小のパラメータが in vitro で求められたパラメータより 100 倍ほど乖離するという現象が見られた。そのため、in vitro の試験のデータも血中濃度に加えてデータとしてフィッティング対象に加え CGNM によりパラメータ推定を行う middle-out 手法を活用された解析を提唱された。

ここまでの講演において CGNM を用いた PBPK モデル解析の例を何件か拝聴したのち、定量的システム薬理学に関するご講演をいただいた。PBPK モデルは、体外から人為的に投与された薬剤はある一定時間後各臓器から単調減少するという現象を前提として作成されており、その現象を再現するパラメータの範囲は簡単にもとまる（大抵のパラメータは非負そして、比率のパラメータは 0 から 1 の間など）。つまりは、外部入力に対して変化した生体状態は時間が経てば外部入力前の状況に戻るという条件を満たすパラメータ範囲を PBPK モデルでは通常明示的に示すことができる。しかしながら、代謝ネットワークモデルのような数理モデルだと、そのようなパラメータの範囲は容易にはもとまらない。この問題を解決するために、開発された TEAPS という手法とその応用に関して、東京大学の本間先生と刈谷先生にご講演をいただいた。

本間先生には主に手法的な観点からご講演をいただき、システム挙動の特徴を目的関数に設定し、クラスターニュートン法を用いてその目的関数を解くことにより、パラメータの制約条件を数値的に解析できるということを示していただいた。刈谷先生のご講演では TEAPS を NF- κ B シグナル伝達モデルおよびアラキドン酸代謝経路モデルに応用した解析例を主に講演してくださった。ご両名のご講演では目的関数の設定の巧妙さに加え、数値的に見つけられたパラメータ範囲制約条件の妥当性を主成分分析などによって使って示されとても興味深く拝聴させていただいた。



この後ヤンセンファーマ株式会社の岩城先生から薬物動態 5-alpha-reductase 阻害薬の CGNM 解析のご講演をいただいた。最近では、高分子薬のみならず低分子薬でも薬剤が標的に結合することの影響で血中濃度が投与量に対して非線形な挙動を示すことが知られ始め PBPK モデルを使っての解析対象になっている。ご講演いただいた解析で用いられた二つの薬剤でもこのような傾向が見られ、その様に複雑な薬物動態そして、作用までも含めた複雑なモデルを CGNM の特徴を活かして解析されていた。

最後に日本新薬株式会社の佐々木先生からプロドラッグ型化合物である Selexipag の薬物間相互作用 PBPK モデル解析についてのご講演をいただいた。代謝物に薬効があるプロドラッグでは投与された薬剤そのものの薬物動態モデルに加え、活性代謝物の生成に関わる代謝に関わるモデル記述が必要になる。またそれに加えて他剤における阻害の影響を考察するためのモデリングなので非常に複雑でまたパラメータが多いモデル解析が行われていた。非常に複雑なモデル解析であり技術的な部分にも多々苦労されてそれを克服されてきたのだらうと想像し感銘を受けた。それにも増して解析結果を考察され、「酵素、トランスポーターのインタープレイ」を明快にまとめられていたのは本講演会を締めくくりに最適なご講演だったと思う。

本講演会では通常の PBPK モデルよりより複雑な数理モデルを使った解析例を知ることができ、またその複雑な解析を可能にするような手法も開発されている現状を報告させていただくことができたかと思う。

活発な議論を促進するために、今回はワークショップをオンラインではなく対面式で開催した。完全に平時というわけにもかかわらず、約 50 名にご参加いただき、生理学および薬理学的システムの機構モデルに基づく分析に関する活発な議論と質疑応答セッションを成功裏に実施させていただけた。ご参加いただいた皆様および、開催にご尽力くださった事務局の方々にこの場を借りて謝意を示させていただきます。

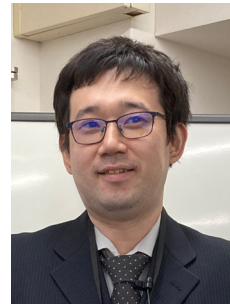
(青木 康憲 (Astrazeneca, Sweden, 城西国際大学))



青木康憲先生



杉山雄一先生



年本広太先生



本間雅先生



荻谷嘉顕先生



岩城雪先生



佐々木佳寛先生



今後の講演会 予定

詳細や申込み方法は CBI 学会ホームページ：講演会のページをご参照ください

https://cbi-society.org/home/meeting_seminar.html

第 443 回 CBI 学会講演会

「創薬を加速する巨大ケミカルスペース」

日程：2023 年 3 月 17 日（金）13:00 - 17:50

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：高橋 瑞稀（第一三共 RD ノバーレ株式会社）、遠藤 真弓（大正製薬株式会社）、大槻 幸恵（大鵬薬品工業株式会社）、大原 康徳（日本たばこ産業株式会社）、奥田 歩（興和株式会社）、狩野 敦（株式会社モルシス）、佐藤 太郎（杏林製薬株式会社）、村崎 広太（田辺三菱製薬株式会社）

第 444 回 CBI 学会講演会

「創薬業界の多様なキャリアパス

～ Wet 研究から Dry 研究にキャリアチェンジした方に焦点を当てて～」

日程：2023 年 5 月 12 日（金）13:00 - 17:30

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：高橋 瑞稀（第一三共 RD ノバーレ株式会社）、遠藤 真弓（大正製薬株式会社）、大槻 幸恵（大鵬薬品工業株式会社）、大原 康徳（日本たばこ産業株式会社）、奥田 歩（興和株式会社）、狩野 敦（株式会社モルシス）、佐藤 太郎（杏林製薬株式会社）、村崎 広太（田辺三菱製薬株式会社）

第 445 回 CBI 学会講演会

「創薬ベンチャーエコシステムの現状とそこから見える創薬の未来像」

日程：2023 年 5 月 26 日（金）13:00 - 17:30

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：木下 誉富（大阪公立大学）、福澤 薫（大阪大）、植松 直也（大塚製薬）

主催：CBI 学会関西部会

共催：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

委員会報告

創薬研究会運営委員会

第 56 回創薬研究会運営委員会

日時：2022 年 11 月 17 日 (木) 10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題と討議事項

- (1) 日本薬系学会連合設立に関する説明会」のご案内について
- (2) 今後の創薬研究会講演会開催予定について
- (3) グループの前回討議内容のフィードバック
＜ブレイクアウトルーム＞
- (4) グループで企画討議

第 57 回創薬研究会運営委員会

日時：2022 年 1 月 19 日 (木) 10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題と討議事項

- (1) メンバーの委員会担当変更について
- (2) 今後の創薬研究会講演会開催予定について
- (3) グループの前回討議内容のフィードバック
- (4) インターンシップの可能性に関するアンケート実施について
- (5) 運営委員の google workspace 追加について
＜ブレイクアウトルーム＞
- (6) グループで企画討議

関西部会運営委員会

日時：2022 年 11 月 24 日 (木) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 新規運営委員ご紹介

- (2) 次回の講演会の開催について
- (3) 2023 年春の講演会について
- (4) 2023 年 9 月頃の講演会について
- (5) 今後の講演会テーマについて
- (6) 次回運営委員会の予定

執行部会

第 86 回執行部会

日時：2022 年 11 月 24 日 (木) 18:00 - 18:50

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 若手メンバーの執行部会（オブザーバー）参加について
- (2) 年会担当：2022 年大会報告、2023 年大会概要説明
- (3) 会計、事務局担当：大会決算報告
- (4) 渉外担当：協賛、案内配信等の報告
- (5) 学会誌担当：第 10 巻 4 号（大会特集号）発刊準備報告
- (6) 出版事業担当：特に動きなし
- (7) 編集担当：投稿状況、公開準備状況の報告
- (8) 新規事業担当：特に無し
- (9) 地域担当：関西部会の今後の講演会予定について
- (10) 若手の会：大会企画開催報告、口頭発表賞ポスター賞受賞者による講演の企画
- (11) 研究推進委員会：研究会新規設立申込受理【分子ロボティクス研究会】
- (12) 創薬研究会：日本薬系学会連合の設立について、今後の講演会の計画について
- (13) ベンチャー連携：ベンチャー連携企画の講演会について
- (14) CBI 研究機構：文科省 研究機関指定に関する要綱についての説明
- (15) 事務局担当理事：Google workspace の導入について

第 87 回執行部会

日時：2022 年 12 月 23 日 (木) 18:00 - 19:10

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2023 年大会準備状況、新企画等の説明
- (2) 会計、事務局担当：会計年度変更、2022 年度会計の締めについて
- (3) 渉外担当担当：協賛・配信等の報告
- (4) 学会誌担当：CBI 学会誌第 10 巻 第 4 号公開の報告
- (5) 出版事業担当：特になし
- (6) 編集担当：2022 年度第一回 CBI ジャーナル編集委員会（11/25）報告
- (7) 新規事業担当：人材バンクについての進捗報告
- (8) 地域担当：関西部会の議事録の共有
- (9) 若手の会：第 7 回 CBI 若手の会講演会について
- (10) 研究推進委員会：分子ロボティクス研究会新設の審議・報告、個別化医療研究会の審議、計算毒性学研究会の名称変更の報告
- (11) 創薬研究会：特になし
- (12) ベンチャー連携：11 月 18 日の講演会事後アンケート結果の情報共有、今後の企画について
- (13) CBI 研究機構：各研究所の活動の報告、Google Workspace の利用について
- (14) 事務局担当理事 2023 年度スケジュール、2023 年度 CBI 学会賞・CBI 学会若手奨励賞募集について

第 88 回執行部会

日時：2023 年 1 月 20 日 (金) 18:00 - 18:45

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2023 年大会準備状況報告、開催日程について
- (2) 会計、事務局担当：インボイス制度の対応について
- (3) 渉外担当担当：協賛・配信等の報告
- (4) 学会誌担当：今後の掲載記事予定
- (5) 出版事業担当：特になし
- (6) 編集担当：編集委員会開催報告、分野長交代、次期編集委員長について、投稿数増加の報告
- (7) 新規事業担当：特になし
- (8) 地域担当：関西部会の議事録の共有
- (9) 若手の会：次回講演会について
- (10) 研究推進委員会：分子ロボティクス研究会新設について
- (11) 創薬研究会：CBI 学会主催のインターシップ開催についてのヒヤリング、Google Workspace の活用講演会のページに Twitte ボタンを設置する
- (12) ベンチャー連携：第 2 回ベンチャー連携講演会予定、第 3 回の企画について、関西部会との連携
- (13) CBI 研究機構：科研費の研究機関指定申請について
- (14) 事務局担当理事：2023 年度 CBI 学会賞・CBI 学会若手奨励賞募集開始

CBI ジャーナル編集委員会

第 2 回 CBI ジャーナル分野長会議

日時：2022 年 11 月 25 日 (金) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 論文投稿状況、新体制、分野長会議、Opinion 進捗状況等の報告

- (2) 編集委員の専門分野リストの作成と共有
- (3) 次期 (副) 編集委員長選定のスケジュール
- (4) CBIJ の論文のクオリティの基準
- (5) CBIJ が目指す指標 (IF 以外など)
- (6) その他、投稿論文を増やす企画など

CBI 研究機構

第 21 回運営会議

日時：2022 年 11 月 22 日 (火) 16:30 - 17:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 科研費申請に関わる研究機関指定申請について
- (2) 研究所の進捗報告
 - ① 先端領域 ELSI 研究所：市民講座開催報告
 - ② 量子構造生物科学研究所：量子構造生命科学研究所シンポジウムの件、大会でシンポジウム開催の件
 - ③ 次世代モダリティ研究所：第 4 回次世代モダリティセミナー「CAR-T 細胞治療の現在と未来」報告
- (3) その他：人材バンクに関して

第 22 回運営会議

日時：2022 年 12 月 19 日 (月) 8:00 - 8:50

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 科研費申請に関わる研究機関指定申請について、コンプライアンス教育実施計画書のドラフトについて
- (2) 研究所の進捗報告
 - ① 先端領域 ELSI 研究所：分子ロボット倫理研究会発起人募集について
 - ② 量子構造生物科学研究所：量子構造生命科学研究所オンラインシンポジウム開催報告
 - ③ 次世代モダリティ研究所：新規会員入会の報告
- (3) その他：Google Workspace の利用について、CBI 研究機構 R&D 費に関して

第 23 回運営会議

日時：2023 年 1 月 24 日 (火) 8:00 - 8:50

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 科研費申請に関わる研究機関指定申請について
- (2) その他：Google Workspace の利用について

2023 年大会プログラム委員会

第 1 回 2023 年大会プログラム委員会

日時：2023 年 1 月 27 日 (金) 9:00-11:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

報告

- (1) プログラム委員の自己紹介
- (2) 2022 年大会の報告
- (3) 2023 年大会 大会案内
- (4) 2023 年大会 プログラム枠

討議事項

- (1) 2023 年大会プログラム時間枠 (案)
- (2) 2023 年大会カテゴリと参考キーワード (案)
- (3) 口頭発表・ポスター発表 募集 (案)
- (4) 口頭発表枠 (案)
- (5) Travel award の募集要項
- (6) フォーカストセッション 企画提案募集
- (7) 展示会場レイアウト (案)
- (8) 大会までのスケジュールについて

2023 年大会実行委員会

第 1 回 2023 年大会実行委員会

日時：2023 年 1 月 23 日 (月) 9:00-10:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 実行委員の紹介と担当

(2) 2023 年大会の概要

(3) 参加費

(4) 出展費

(5) スポンサー募集

(6) 大会システム

(7) 広報ポスター

(8) ポスター発表・展示会場のレイアウト

(9) 会場、業者との連絡の状況 (事務局)

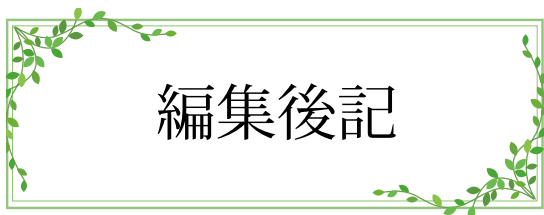
(10) プログラム委員会

(11) Travel Award

(12) 大会までのスケジュール

(13) 他団体への協賛依頼





編集後記

暖かい日があるものの、半年前の暑さが嘘のような寒い日々である。年のせいであろうか、あっという間に時が流れて行く…。

さて、本年第 1 号の巻頭言は、2012 年に 3 つの学会（日本バイオインフォマティクス学会 (JSBi)、情報計算化学生物学会 (CBI 学会)、オミックス医療研究会）によって開催された生命医薬情報学連合大会の副大会長を務められた山村先生に執筆頂きました。表紙を飾る図は、先生の HP に掲載されているものをお借りしました。

ホットトピックスでは、江崎先生による「[Q-raKtion: 生物活性データポイントをキュレーションするための半自動 KNIME ワークフロー]」の紹介がなされています。

著者が紹介する CBI 掲載論文では、「Difficulties and prospects of data curation for ADME in silico modeling ADME (データのキュレーションにおける難しさと展望算)」(江崎、池田) と題する論文を紹介して頂きました。

CBI 研究機構便りでは、次世代モダリティ研究所により開催された第 4 回次世代モダリティセミナーのプログラム (3 先生によるご講演とパネルディスカッション) が紹介されています。

若手の会キャリア第 4 回の「私のキャリアパス紹介」では、「研究、営業、事業開発を経て、投資と企業経営へ」、と題した内容の濃い大作を頂きました。

日の出は少しずつ早く (日の入りは少しずつ遅く) なり、桜の季節、卒業、入学の季節へと向かっています。少しずつでも COVID-19 以前の状況に戻る年となってほしいものです。

本号のご紹介とともに、寄稿頂きました皆様に御礼申し上げます。(T. M.)

CBI 学会誌 第 11 卷 第 1 号

2023 年 3 月 1 日発刊

CBI 学会誌編集委員会：水間 俊、高岡 雄司

制作：小澤 陽子 藤田 真澄 塩塚 真理 牛尾 律子 岸 早絵

高澤 恵 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。

