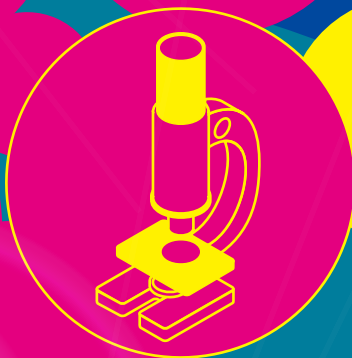


CBI学会2021年大会

デジタルトランスフォーメーションで

目指すライフサイエンス革命

～ AI駆動型の創薬戦略～



会期:

2021年10月26日(火)-28日(木)

WEB配信によるオンライン開催

情報計算化学生物学会(CBI学会)

CBI 学会 2021 年大会

<オンライン開催>

デジタルトランスフォーメーションで目指す ライフサイエンス革命 ～AI 駆動型の創薬戦略～

会期：2021 年 10 月 26 日(火)–28 日(木)

CBI 学会 2021 年大会

大会長： 奥野 恭史 (京都大学大学院医学研究科)
実行委員長： 中嶋 久士 (株式会社エクサウィザーズ)
副実行委員長： 嶋田 朋嘉 (第一三共株式会社)

**Chem-Bio Informatics Society (CBI)
ONLINE Annual Meeting 2021**

“Digital Transformation Revolutionizes Life Science ~New Strategies of AI-Driven Drug Discovery~”

Dates: October 26 (Tue) – 28 (Thu), 2021

Conference Chairperson

Yasushi Okuno (Kyoto University)

Organizing Chairperson

Hisashi Nakashima (ExaWizards Inc.)

Organizing Vice-Chairperson

Tomohiro Shimada (Daiichi Sankyo Co., Ltd.)

CBI 学会 2021 年大会事務局

Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2021 Secretariat

目 次

Contents

CBI 学会 会長挨拶.....	1
CBI 学会 2021 年大会 大会長挨拶	2
CBI 学会 2021 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.....	7
企業広告.....	11
企業ロゴ.....	17
来年度大会のお知らせ.....	19

要旨集－分冊－

Separate volumes

CBI2021 概要	◆ 予稿集 2021 概要		
	◆ プログラム		
	Zoom Webinar	Zoom ブレイクアウトルーム	
<10月25日>		◆ 25日 TS	
<10月26日>	◆ 26日 Webinar	◆ 26日 LS/SS/FS	◆ 26日 口頭発表 1,2
<10月27日>	◆ 27日 Webinar	◆ 27日 LS/SS/FS	◆ 27日 口頭発表 3,4
<10月28日>	◆ 28日 Webinar	◆ 28日 LS/FS	◆ 28日 口頭発表 5
	Remo 会場		
<26～28日>	◆ 企業セッション ES (Remo)		
	◆ ポスター発表 (Remo)		

CBI学会 会長挨拶

－CBI学会 2021年大会の開催に向けて－

CBI学会 2021年大会は、10月26日（火）から28日（木）までの3日間、奥野恭史大会長、中嶋久士実行委員長、嶋田朋嘉副実行委員長のもと、『デジタルトランスフォーメーションで目指すライフサイエンス革命～AI駆動型の創薬戦略～』というテーマで開催されます。開催にあたり、ご多忙のなか、このような大変魅力的なテーマを企画いただいた奥野大会長、実際の運営の現場で、工夫を凝らしたプログラムで大会を活性化いただいた中嶋実行委員長、嶋田副実行委員長に改めて御礼申し上げます。

CBI学会では以前よりAI創薬の可能性に注目し、研究講演会や年次大会のトピックとしとりあげ、皆様と議論を重ねてまいりました。最近では、AIという言葉をいたるところで目にするようになっており、生活の中に着実に定着し、欠かせないものになりつつありますが、AI創薬も、新たな手法の開発から始まり、現在は、創薬の様々なプロセスで現実的な活用が進められており、既に成功例が生まれています。同様にデジタルトランスフォーメーションも、まさに国をあげて取り組まれていて、言葉を聞かない日はないのが現状かと思えます。

このような状況の中、日本のAI創薬を牽引されてきました奥野先生に大会長として今回のCBI学会 2021大会を開催いただくことは、私も含めCBI学会会員にとって何より喜ばしいこととあります。日本のAI創薬が今、どこにいるのか、そしてこれからどこに向かおうとしているのか、今回の大会は参加者の皆様に、多くのヒントを与えてくれることと確信しております。CBI学会が関心をもって取り上げてきたAI創薬という大きな課題を考える上で、一つの区切りになる大会となることでしょう。

CBI学会 2021大会は、昨年と同様にコロナウィルスの感染拡大が収まらない状況で、オンラインでの開催となっており、CBI学会の特徴である、様々な研究領域のかたの交流ができない状況が続いてしまいました。一方、オンラインという制限のなかでも、できるだけ交流ができるような工夫を検討し、今回の開催を迎えております。

コロナ禍という大変厳しい状況の中での開催となりますが、今回のテーマに関わっておられる方、ご興味をお持ちの方、さらにはこれから勉強されたいと思われている方にとっても有意義な大会になることを期待しております。そのなかでCBI学会の特徴である、多種多様なテーマの横のつながりを感じ取っていただけたら幸いです。最後に皆様にとって実りの多い3日間となることを祈念して、ご挨拶とさせていただきます。

CBI学会 会長

片倉 晋一（慶應義塾大学）

CBI 学会 2021 年大会 大会長挨拶

デジタルトランスフォーメーションで目指すライフサイエンス革命 ～AI 駆動型の創薬戦略～ 開催にあたって

ビッグデータ、AI、DX、デジタルツイン・・・、毎年のように新しいバズワードが生まれ、何となく気ぜわしい・・・。皆さん、そう思われませんか。

何故、これらはバズワード化してしまうのでしょうか。これらは手段、技術であって、目的ではないということに起因するのではないかと私は考えています。例えば、製薬企業にとって、AI を開発することは目的ではなく、薬を創ることが目的であり、AI はその目的を達成する手段・技術の一つに過ぎません。にもかかわらず、AI を使うことでこれまで出来なかった新薬が出来たかのような報道が時折りなされ、やがて画期的新薬を作るためには AI が必要不可欠である、よって AI 開発そのものが創薬の目的であると錯覚してしまうのです。

本大会のキーワードは、デジタルトランスフォーメーション (DX) です。DX とは単なるデジタル化を実践するだけではなく、デジタル技術を手段として用いることで、社会、会社、仕組み等を変革することを意味しています。大切なことは、DX は目的ではなく、手段に過ぎないということ、つまり DX によって何をを目指すのかが最も重要になります。例えば、会社によっては、業務効率を上げるために DX 化する、デジタル技術を駆使することで新規事業開拓を行うなど、目的は千差万別です。本大会の主題である「ライフサイエンスにおける DX」においても、ライフサイエンス分野を DX 化することが目的ではなく、DX によってライフサイエンスをどう変えたいのかが重要になります。その目的は、ライフサイエンスに従事する当事者が定めなければならないのです。

さて、COVID-19 は、社会、日常を一変させました。大学ではオンライン授業、会社ではテレワーク、医療業界ではオンライン診療が普通になりつつあります。これはまさにコロナ禍で安全に社会活動する目的のために、DX 化がなされた具体的事例と言えます。では、製薬業界に、COVID-19 が与えたインパクトは何でしょうか。私が受けた衝撃は、1 年以内に治療薬、ワクチンを私たちが手にすることが出来た事実です。このことは開発期間 10 年以上のこれまでの医薬品開発の常識を覆しかねないインパクトと考えられます。しかしながら、治療薬、ワクチンのすべてが欧米発であることから日本の製薬業界にとっては決して楽観視できることではありません。もしもこれを機に欧米では開発期間 5 年が創薬のニューノーマルになったとしたら、日本の製薬企業も業務フローの超効率化を余儀なく求められることになるでしょう。ここで開発フローの超効率化という目的を達成するための手段に DX は必要不可欠であることは言うまでもありません。

本大会を通じて、DX によって創薬をはじめとするライフサイエンスの何をどう変革するのか、DX を何のために使うのか、その真の目的をあらためて考え直すきっかけになれば幸甚です。

CBI 学会 2021 年大会 大会長

奥野 恭史 (京都大学大学院医学研究科)

CBI 学会 2021 年大会 実行委員長挨拶

デジタルトランスフォーメーションで目指すライフサイエンス革命 ～AI 駆動型の創薬戦略～

CBI 学会 2021 年の大会も無事に開催できました。大会長、副実行委員長はもちろん、学会役員、学会会員、スポンサー企業の皆様はじめ、実行委員会、プログラム委員会、学会事務局の方々お力添えいただいたおかげでございます、改めまして御礼申し上げます。

3 年ほど前に片倉会長より人工知能（Artificial Intelligence: AI）をテーマに大会を開催したいからと協力を依頼されました。その際には、20 年近く運営してきた大会のノウハウが事務局にはあり、研究講演会の大規模版と考えれば、大丈夫とのことでしたので、軽い気持ちでお受けしました。ところが、新型コロナウイルスの拡大の影響で去年は急遽オンライン開催、今年は企画段階からオンラインで開催することとなり、想定外の連続でございました。学会事務局、プログラム委員、若手の会を中心に運営を進行して参りますが、新しい Web ツールも駆使しての手探りでの運営となっております。トラブルが発生することも想定しております、慌てず見守っていただけますれば幸甚でございます。

さて、製薬業界にも新型コロナウイルスの影響は、大きく取り巻く環境にも変化を及ぼしました。ワクチンの接種率が連日報道され、多くの国民が国産の新型コロナワクチン/治療薬の上市を期待しております。そのような世論を反映したのか、厚生労働省から「医薬品産業ビジョン 2021」が公表されました。その中では「世界有数の創薬先進国として、**革新的創薬**により我が国の健康寿命の延伸に寄与するとともに、医学研究や産業技術力の向上を通じ、産業・経済の発展に寄与する」ことがビジョンのひとつとして掲げられています。特に、**<革新的創薬>**が医薬品産業政策の基本的方向性の第一として明記され、**絶え間ないイノベーションにより創薬力の強化を継続**しなければならないと示されています。

初日のプレナリー講演では、「医薬品産業ビジョン 2021」策定に関与した林様（厚生労働省）から、革新的創薬について、日本製薬工業協会の新留様より、「製薬協 政策提言 2021」を中心に創薬イノベーション創出に向けた取組みについて、エクサウィザーズの石山様より、デジタルトランスフォーメーション×イノベーション創出の理論についてそれぞれご紹介いただき、「デジタルトランスフォーメーションで目指すライフサイエンス革命」について議論を進めてまいります。その後のセッションでは AI 駆動型の創薬戦略から創薬エコシステム構築について、より具体的な議論となることを願っております。

CBI 学会 2021 年大会 実行委員長

中嶋 久士 （株式会社エクサウィザーズ）

協賛団体
Academic Association

<協賛>

日本応用数理学会

日本分子生物学会

日本生物物理学会

日本薬理学会

日本生理学会

日本バイオインフォマティクス学会

情報処理学会

<Cooperated by>

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics (JSIAM)

The Molecular Biology Society of Japan (MBSJ)

The Biophysical Society of Japan (BSJ)

The Japanese Pharmacological Society (JPS)

The Physiological Society of Japan (PSJ)

Japanese Society for Bioinformatics (JSBi)

Information Processing Society of Japan (IPSJ)

大会スポンサー

Sponsors

<シンポジウム>

AMED/BINDS インシリコユニットにおける
創薬支援研究

国立研究開発法人 日本医療研究開発機構

AMED-MPS プロジェクトの5年間を振り返って
- MPS (生体模倣システム) の今後を考える -

< Symposium >

Research activities for supporting drug
discovery by *in-silico* unit of BINDS (AMED)

Japan Agency for Medical Research and
Development (AMED)

Reviewing the five years of the AMED
-MPS Project -The future of MPS
(microphysiological systems) -

<ランチタイムセミナー>

エルゼビア・ジャパン株式会社

オープンアイ・ジャパン株式会社

富士通株式会社

< Lunchtime Seminar >

Elsevier Japan KK

OpenEye Japan Co., Ltd.

Fujitsu Limited

<スポンサーセッション>

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社

インフォコム株式会社

株式会社 Elix

経済産業省研究開発事業 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)

株式会社ジー・サーチ

シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社

ジュビラント バイオシス リミテッド

Schrödinger

新世代中性子構造生物学研究会

ダッソー・システムズ株式会社

ドットマティクス株式会社

日本蛋白質構造データバンク/
ケンブリッジ結晶学データセンター

ブルカージャパン株式会社

< Sponsored Session >

Amazon Web Services Japan K.K.

INFOCOM CORPORATION

Elix, Inc.

"AI-based Substance Hazard Integrated
Prediction System (AI-SHIPS) Project" (The
Ministry of Economy, Trade and Industry,
Research and Development)

G-Search Limited

Sigma-Aldrich Japan G.K.

Jubilant Biosys Limited

Schrödinger

Investigation Group for New Generation
Neutron Structural Biology

Dassault Systèmes K.K.

Dotmatics Ltd

Protein Data Bank Japan (PDBj)/
The Cambridge Crystallographic Data
Centre (CCDC)

Bruker Japan 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.

株式会社ワールドフュージョン

World Fusion Co., LTD.

<企業セッション>

< Enterprise Session >

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社

Amazon Web Services Japan K.K.

SCSK 株式会社/
グラフコア・ジャパン株式会社

SCSK Corpotation/
Graphcore Japan KK

株式会社 Elix

Elix, Inc.

コンフレックス株式会社

CONFLEX Corporation

ダッソー・システムズ株式会社

Dassault Systèmes K.K.

ドットマティクス株式会社

Dotmatics Ltd.

パトコア株式会社

Patcore, Inc.

ブルカージャパン株式会社

Bruker Japan K.K.

株式会社モルシス

MOLSIS Inc.

<広告掲載>

< Advertisement >

三井情報株式会社

MITSUI KNOWLEDGE INDUSTRY CO., LTD.

株式会社シーエーシー

CAC Corporation

ケンブリッジクオンタムコンピューティング
ジャパン株式会社

Cambridge Quantum Computing Japan

Collaborative Drug Discovery 株式会社

Collaborative Drug Discovery. Inc

<ロゴスポンサー>

<Logo Sponsor>

茨城県中性子ビームライン

IBARAKI Neutron Beamline

三井情報株式会社

MITSUI KNOWLEDGE INDUSTRY CO., LTD.

大会組織委員会

CBI2021 Committee Members

<CBI学会 2021年大会大会長> Conference Chairperson

奥野 恭史 (京都大学大学院医学研究科)
Yasushi Okuno (Graduate School of Medicine and Faculty of Medicine Kyoto University)

<大会実行委員会> Organizing Committee

実行委員長 Chairperson

中嶋 久士 (株式会社エクサウィザーズ)
Hisashi Nakashima (ExaWizards Inc.)

副実行委員長 Vice-Chairperson

嶋田 朋嘉 (第一三共株式会社)
Tomohiro Shimada (DAIICHI SANKYO COMPANY, LIMITED)

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

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

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)

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)

福澤 薫 (星薬科大学)
Kaori Fukuzawa (Hoshi University)

茂櫛 薫 (富士通株式会社)
Kaoru Mogushi (Fujitsu Limited)

<大会企画委員会> Planning Committee

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

山田 泰永 (NVIDIA)
Taiei Yamada (NVIDIA)

<プログラム委員会> Program Committee

委員長 Chairperson

福澤 薫 (星薬科大学)
Kaori Fukuzawa (Hoshi 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.)

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)

上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)
Midori Kamimura (Teijin Pharma Limited)

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)

木下 誉富 (大阪府立大学)
Takayoshi Kinoshita (Osaka Prefecture University)

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

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 (横浜市立大学)
Tomohiro Sato (Yokohama City University)

佐藤 佑介 (東北大学)
Yusuke Sato (Tohoku University)

嶋田 朋嘉 (第一三共株式会社)
Tomohiro Shimada (DAIICHI SANKYO COMPANY, LIMITED)

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)

高岡 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 (理化学研究所)
Daisuke Takaya (RIKEN)

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 学会)
Yukio Tada (The Chem-Bio Informatics Society)

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)

中嶋 久士 (株式会社エクサウィザーズ)
Hisashi Nakashima (ExaWizards Inc.)

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)

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

藤田 直也 (大鵬薬品工業株式会社)
Naoya Fujita (TAIHO PHARMACEUTICAL CO., LTD.)

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)

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)

茂籙 薫 (富士通株式会社)
Kaoru Mogushi (Fujitsu Limited)

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.)

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

渡邊 怜子 (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所)
Reiko Watanabe (National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition)

企業広告

三井情報株式会社

株式会社シーエーシー

ケンブリッジクオンタムコンピューティングジャパン株式会社

Collaborative Drug Discovery

タンパク質立体構造評価システム

QAEmap

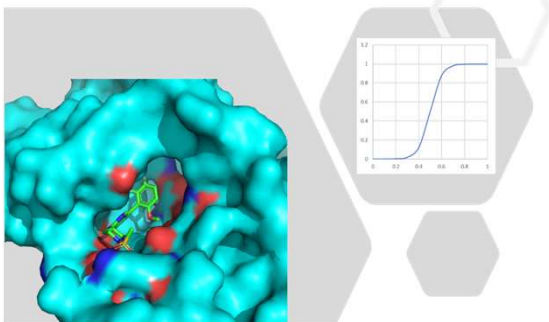


- 低解像度の電子密度マップから作られたタンパク質立体構造の評価
- 評価スコアに基づく**不正確な構造の検出や修正**が可能

- 深層学習により高解像度の電子密度マップの特徴を抽出
- 低解像度のマップから**高解像度のマップを推定**し、両マップ間の相関を算出

タンパク質リガンド活性値予測システム

KASSAY

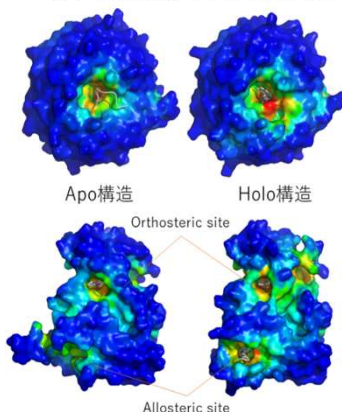


- タンパク質とリガンドの複合体座標に基づくリガンド活性値の予測
- エネルギーベースの従来手法とは異なる指標での**深層学習**による結合親和性の予測を実現
- ドッキングやMDなどで生成された複合体構造に基づく空間的な原子の相対位置や構造情報の予測
- **新規化合物の探索**や**リード化合物の最適化**を支援

タンパク質リガンド結合領域予測システム

DeepSeeker

ペプチド結合構造 低分子化合物結合



- タンパク質の立体構造を入力値とし、リガンドが結合可能な**ポケットをAIを用いて予測**
- 短時間で精度の高いポケットの予測が可能
- ペプチド等が結合する中分子ポケットへの低分子リガンドの結合可能性の判定 (**ペプチドリガンドの低分子化**に応用可)
- MDのスナップショット構造を評価し、**バーチャルスクリーニング**に用いる構造の選出にも適用可能

dotmatics

● ● ● knowledge solutions

Dotmaticsは、研究過程で発生したデータの集約、管理、共有を支援する統合的なソリューションで **世界各国400社以上** で利用されています。創薬化学関連(化学、バイオ、アッセイ等)のデータを扱うための製品群を提供しております。

製品の特長

Webアプリケーションで構成

- 各種ブラウザ(Chromeなど)へ対応。
OS依存度が低くWindows更新の影響が軽微。

カスタマイズ不要なシステム

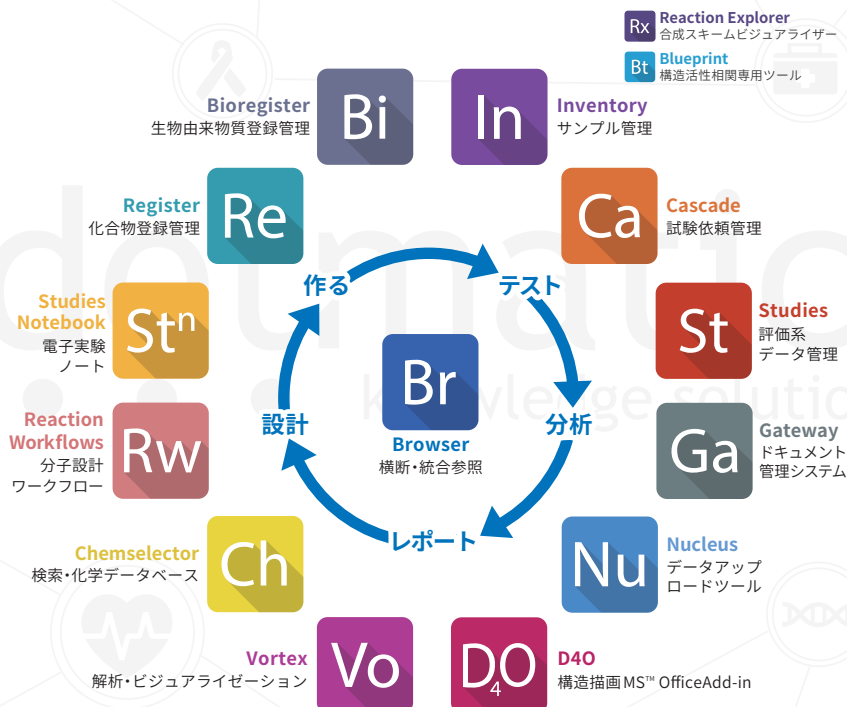
- 様々な機能が設定レベルで利用可能。

定期的な製品バージョンアップ

- 6~12か月で新しい機能が追加され、お客様のニーズに対応。

導入、バージョンアップの容易性

- シングルソースで管理されており、容易にバージョンアップが可能。



導入から安定稼働までをシーエーシーが手厚くサポート



導入支援

複数社への導入経験をもとにスムーズな導入プロセスを遂行いたします。



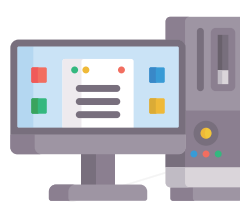
保守サポート

運用後の様々なご要望に対応し安定稼働をご支援いたします。



コンサルティング

創薬に関わる業務知識をベースにドットマティクス社と連携しコンサルティング支援を実施します。



PoC(概念実証)

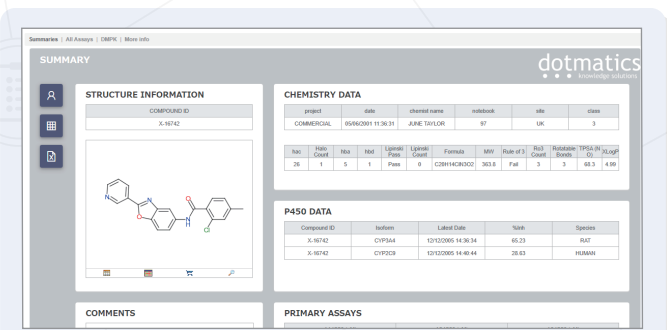
製品の機能検証にお使いいただける検証環境を提供いたします。



ライセンス提供

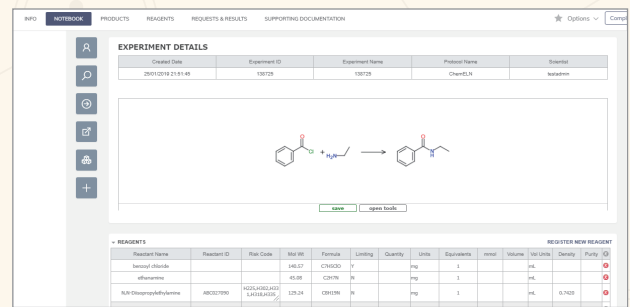
Dotmatics製品の日本代理店としてライセンス販売はシーエーシーにお任せください。

主要製品概要



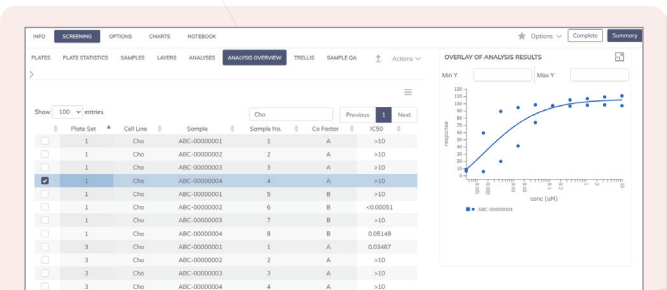
Br Browser (横断・統合参照)

- Dotmatics及び連携システム内のデータを横断的に検索可能
- データを文字列、数値、構造的で検索可能
- データソースを最適化し迅速な検索を実現
- 画面レイアウトをドラッグ&ドロップで簡単に作成可能
- フォーム、テーブル、チャートなどで実験データを可視化



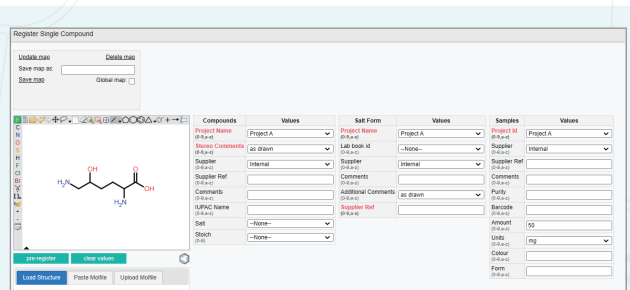
Stn Studies Notebook (電子実験ノート)

- 各種実験結果を取り込み、過去実験の検索性を向上
- 分子量などを自動計算し、実験者の作業負担を軽減
- 実験タイプ毎にテンプレートを定義し、実験結果の登録を標準化
- 電子署名ワークフローを定義し、知的財産の保護と監査が可能



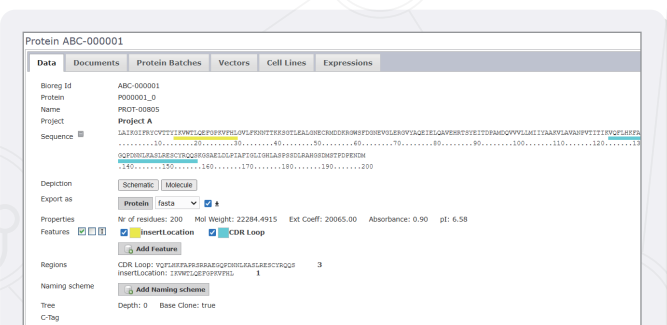
St Studies (評価系データ管理)

- アッセイデータの管理及び分析が可能
- 柔軟なプロトコル定義、スクリーニングに必要な様々なデータの登録が可能
- Plate管理が可能で、Inventoryと連携してより快適な使用感を提供
- Ultra HTSや用量反応、Kineticを含む様々なアッセイをサポート
- 拡張機能「Screening Ultra」により視認性・操作性を向上、アッセイデータ処理の自動化を実現



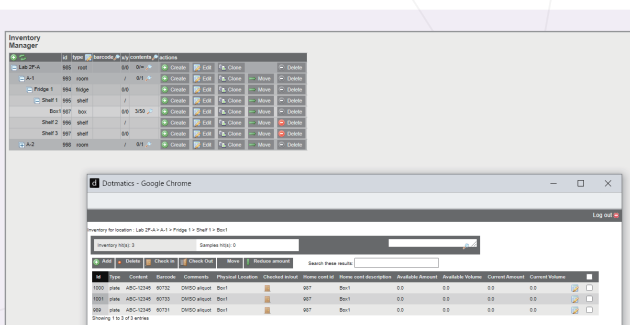
Re Register (化合物登録管理)

- 合成・取得した化合物の化学構造と関連データを紐づけて登録・管理
- ID書式、塩やバッチなどを企業のルールに応じて設定可能
- Studies Notebookと連携し、実験記録から化合物を直接登録
- サードパーティ製品の描画ツールとも連携可能



Bi Bioregister (生物由来物質登録管理)

- 核酸、ペプチド、抗体など、幅広いバイオ系モダリティを登録可能
- 非天然モダリティ(アミノ酸等)の登録・管理にも対応
- モダリティの一意性を判断し、登録番号を自動発番
- Studies Notebookと連携し、モダリティの生産プロセスやアッセイデータを登録・管理



In Inventory (サンプル管理)

- サンプル、試薬、プレート、消耗品などの研究資産を管理
- 名称、保管場所、CAS登録番号などから在庫を照会
- 化合物の有効期限、残量、最大凍結融解サイクルでアラート発信
- Registerと連携し、合成・取得した化合物のサンプルを直接登録

科学研究情報ソリューション「Dotmatics」に関するお問い合わせは、当社営業担当または下記までご連絡ください。



株式会社 シーイーシー

〒103-0015 東京都中央区日本橋箱崎町24-1

〈Dotmatics 製品担当〉

TEL: 03-6667-8046 E-mail: pharma@cac.co.jp

URL: https://service.cac.co.jp/pharma/drug_discovery/dotmatics_integration



THINK LIKE
NATURE,
COMPUTE
LIKE NATURE.

This is Cambridge Quantum.



ケンブリッジ・クオンタム (Cambridge Quantum: CQ) はイギリスのケンブリッジに研究拠点を置く、世界をリードする量子テクノロジー企業です。研究者 100 名以上、うち博士号取得者が 70 名以上在籍し、量子コンピュータ用基盤ソフトウェア (コンパイラ) をはじめ応用分野毎のアプリケーションやサービスを開発しています。超電導型からイオントラップなど、様々な原理に基づく量子コンピュータの実機上で柔軟にプロジェクトを実施する技術を誇ります。2021 年 6 月には、米国 Honeywell 社の量子コンピュータ開発子会社である Honeywell Quantum Solutions (HQS) 社との事業統合を発表しました。これにより、ハード、ソフト、運用サービスを一貫して提供可能な統合型量子コンピュータカンパニーが誕生します。

2014 年に設立された CQ は IBM、Honeywell、JSR 株式会社を主要株主に持ち、Fortune500 に掲載される主要企業や政府とのコラボレーションにより、社会課題の解決に向けて日々最先端の量子コンピューティング技術を研究開発しています。

製品とサービス

- **tket (チケット)**
量子コンピュータ用高性能 SDK
- **EUMEN (ユーメン)**
量子化学計算用アプリケーション
- **IronBridge (アイロンブリッジ)**
次世代型サイバーセキュリティサービス

共同研究分野

量子化学計算 / 量子サイバーセキュリティ / 量子機械学習・最適化 / 量子自然言語処理

主要プレスリリース

2020/4/21

[仏 Total と二酸化炭素回収・利用・貯蔵\(CCUS\)における量子アルゴリズムに関してコラボレーションを発表](#)

2021/1/28

[Roche と創薬・医薬品開発に向けた量子アルゴリズム開発のコラボレーションを発表](#)

2021/2/24

[CrownBio 及び JSR Life Sciences と連携し、新しい癌治療バイオマーカー発見に向けた量子機械学習の活用を発表](#)

2021/4/29

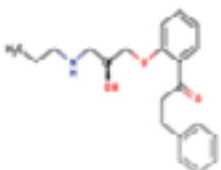
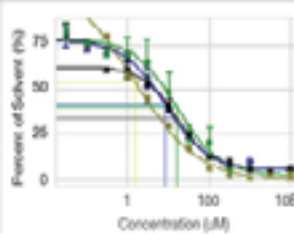
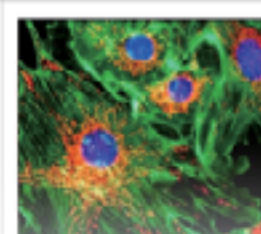
[ドイツ航空宇宙センター\(DLR\)とバッテリーシミュレーションモデル構築において提携](#)

2021/7/23

HQS がイオントラップ型量子コンピュータにおいて、業界で初めて FTQC (Fault Tolerant Quantum Computer) に必要なリアルタイムでの Quantum Error Correction (QEC)プロトコルを実現



CDD VAULT は創薬インフォマティクスのための最適なプラットフォームです。直観的なWEB インターフェースで、プロジェクトチームの化学構造式や生物学アッセイデータの管理、解析、公開に貢献します。

Molecule	Molecule WL	Dose Response Plot	IC50	LE	LipE	elegP	Microscopy Image
CDD-1413022 	341,444		6.68	0.37	2.84	3.64	

ACTIVITY & REGISTRATION

研究データの蓄積と整理

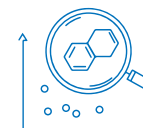


蓄積、検索、解析、そしてレポート

CDD VAULT は化合物の登録、アッセイデータの管理、SAR解析のための最新のWEBアプリケーションです。創薬研究のデータをまとめ、プロジェクトチーム全体のコラボレーションを促します。シンプルで使いやすく、極めて安全です。

VISUALIZATION

プロットとマイニング



対話、計算、比較、そして公開

CDD VAULT は創薬研究データのダイナミックな解析ツールです。興味深いパターンや活性のホットスポットあるいは外れ値を見出せるように、大きなデータセットでもプロットや解析ができます。出版品質の画像により、プロジェクトチーム全体の結果の説明や共有が容易になります。

INVENTORY

化合物を追跡



貸出、追跡、そして保管場所

CDD VAULT は化合物や試薬のための在庫システムです。化合物の各バッチの初期量、使用量、保管場所を管理します。在庫状況を社内や外部の共同研究者と共有できます。

ELECTRIC LAB NOTEBOOK

すべての研究文書

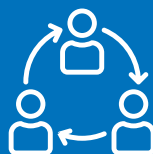


CDD VAULT は究極の電子実験ノートです。化学情報と生物学のアッセイデータを一元管理し、解析や可視化の完璧な機能を備えた環境です。プロジェクトチームのためにデザインされており、すべての実験を簡単にアーカイブしたり検索でき、安全にコラボレーションできます。



COLLABORATIVE
DRUG
DISCOVERY

最新の
創薬インフォマティクス



コラボレーション

組織内、パートナーやCRO、世界的な先駆者達とのコミュニケーションをサポートします。CDDはR&Dデータ管理のホストにおけるパイオニアです。



革新的

CDDは鋭い視点や技術を研究機関へ提供するために、大学や産業の一流の科学者と提携しています。

BLOG (<https://www.collaboratedrug.com/ja/blog/>)で最新のニュースや出版物をご覧ください。

親しみやすさ

創薬チームのためのWEBインターフェースは、ビギナーにとっては直観的で扱いやすく、経験豊富な研究者にとっては十分に強力です。ITの専門知識がなくてもデータを移せます。



強力

最新のWEBブラウザから、すべての研究データを利用できます。全実験データを検索し、SARテーブルやプロットでその結果を確認できます。フィルター、カラーコード、部分構造のハイライト表示はパターンへの視認性に優れています。



導入しやすさ

アカデミックの研究室や立ち上げたばかりのプロジェクト、バイオ医薬品メーカーにとってコスト効果が高いソリューションです。CDD VAULTは優れたサポート体制をもち、チームの成長に合わせたスケールアップが可能です。



チームのための設計

冗長な作業やさまざまなファイルのバージョン管理を回避するために、チーム全体のデータを一か所でまとめて保存できます。どのデータを自分たち専用にして、どのデータを共同研究者に公開するかを完全に制御できます。



マルチドメイン

CDD VAULT は化学および生物学の専門分野をまたいだツールを提供します。化学者によって登録された構造式や、生物学者によってキャプチャーされたアッセイ結果を構造活性相関として表すことができます。



極めて安全

CDD VAULTは知的財産を不慮の損失または漏えいから保護します。CDD VAULT は主要な製薬会社から信頼されています。また、SSAE 16 TYPE II に裏打ちされた高度に安全なクラウドストレージです。





国立研究開発法人
日本医療研究開発機構



来年度大会のお知らせ

CBI 学会 2022 年大会 開催のご案内

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)

医薬品の形は大きく変化してきています。以前は低分子化合物が医薬品の形として主流でしたが、近年は身体の構成成分である核酸もしくは蛋白質が新しい薬の形として社会に受け入れられています。最も注目されるものとして、セントラルドグマを構成する mRNA を用いたワクチンが開発されました。新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)に対して効果を上げて、新興感染症に対する福音となっています。また、異物に対する生体防御として働く抗体が医薬品の形を大きく変革させ、抗体医薬品として医薬品の主要な形の一つとなり市場をリードしています。特に抗がん薬、抗自己免疫疾患薬にこの傾向があります。わが国で発明されたアクテムラ、オプジーボなどもこの抗体医薬品です。また最近では、デジタルアプリ治療という IT を駆使した治療方法も開発されています。これは禁煙だけでなく、生活習慣病改善、脳神経系の治療のためにスマートフォン、タブレットなどデジタル端末を用いての治療方法も開発されつつあります。この開発には、ビッグデータと人工知能 (AI: Artificial Intelligence) 活用が欠かせません。

しかしながら、現在の新しい医薬品の形である核酸医薬品、抗体医薬品やデジタル治療法の基本概念の多くは、日本で発明されたものではありません。そのために現在医薬品の貿易収支は、大きな赤字になっています。

今後、病気で苦しむ患者さんを救うために、世界をリードできる医薬品のさらなる新しい概念が求められています。

2022 年本大会では、情報科学、計算化学、創薬化学、生物学、医療など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ます。ウィズ/ポストコロナの現状も踏まえて、データ共有、AI 開発などの活用によって研究されている新しい医薬品の概念を紹介していただき、患者さんを救うために医療を変える新しい医薬品の概念について議論を深めます。最新状況や今後のニーズを共有し、ポストコロナ時代の新しい医療の概念を創造する機会になれば幸いです。

製薬企業、IT 企業、アカデミアで新しい医療のためにビッグデータ、AI またそれを活用して次世代の医薬品の概念創造を推進している方々、あるいは興味をお持ちの方の積極的な参加をお待ちしております。

CBI 学会 2022 年大会

大会長	坂田 恒昭 (大阪大学共創機構)
実行委員長	福澤 薫 (星薬科大学薬学部)
プログラム委員長	荻島 創一 (東北大学 東北メディカル・メガバンク機構)

CBI学会 2021年大会
2021年10月24日発行

編集責任：奥野 恭史 中嶋 久士
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 2021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 2021
October 24, 2021

Editor in chief: Yasushi Okuno, Hisashi Nakashima
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 2021