

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第 2 卷第 1 号

2014 年 1 月 31 日発行

CBI 学会誌

第2卷 第1号

2014年1月31日発行

CBI 学会

目次

(1) CBI 学会 2013 年大会報告	
CBI 学会 2013 年大会を終えて 岡部 隆義 (CBI 学会 2013 年大会 大会実行委員長、 東京大学創薬オープンイノベーションセンター)	1
招待講演	2
フォーカストセッション報告	4
新学術領域「分子ロボティクス」公開シンポジウム	10
新学術領域「合成生物学」公開シンポジウム	11
チュートリアル	12
企業展	13
ポスター発表	14
(2) 委員会報告	15
(3) 講演会報告・予告	19

CBI 学会 2013 年大会

- 生命医薬情報学連合大会 -

オミックス・計算 そして創薬

日時：2013 年 10 月 28 日 (月) - 31 日 (木)

会場：タワーホール船堀 (東京都江戸川区船堀 4 - 1 - 1)

生命医薬情報学連合大会 大会長：長野 哲雄 (東京大学)

CBI 学会 2013 年大会 大会実行委員長：

岡部 隆義 (東京大学創薬オープンイノベーションセンター)



CBI 学会 2013 年大会を終えて

CBI 学会 2013 年大会 大会実行委員長

岡部 隆義 (東京大学創薬オープンイノベーションセンター)

2013 年度の CBI 学会年会は 10 月 28 日 -31 日の 4 日間に渡ってタワーホール船堀で開催されました。前年同様、日本バイオインフォマティクス学会、オミックス医療研究会との連合大会としての開催です。

CBI 学会は主テーマを「創薬」に設定し、連合大会長の長野哲雄先生の基調講演の他、「アカデミア創薬と産学連携」、「iPS 及び iNSILICO による創薬 ADMET 研究の動向」、「公共データベースの有効活用」、「医薬品設計の新しい展開」、「ドラッグリポジショニング」の各セッションを設けました。新しい試みとして新学術領域「分子ロボティクス」・「合成生物学」との共催によるシンポジウム - 「Emerging Hot Topics in Chem-Bio-Informatics」 -、チュートリアル - 「NGS データ解析入門」及び「FMO 計算実習」 - も開催しました。この他特定のテーマに対するフォーカストセッションを 11 企画し、より深く議論できる場を設定しました。

連合大会全体としての参加者は 600 名を超え、多くの方々に情報交換、交流の機会を提供できたのではないかと考えています。一方いくつかの課題も認識させられました。ひとつはフォーカストセッションの企画が遅れたために、事前周知が十分でなかった点。もうひとつはメイン会場での講演、小会場でのフォーカストセッションの時間配置が必ずしも適切でなかった点です。これら反省事項は 2014 年大会の実行委員会に引き継ぎ、改善に努めて行きます。2014 年大会でも皆様にお会いできるのを楽しみにしています。

◆◆◆ 招待講演 ◆◆◆



長野 哲雄 (東京大学創薬オープンイノベーションセンター)
「東京大学創薬オープンイノベーションセンターの活動」

小原 雄治 (国立遺伝学研究所)
「バイオインフォで生命が分かるか? - 生命情報科学に期待すること -」



酒井 敏行 (京都府立医科大学)
「新規 MEK 阻害剤 trametinib 及び CH5126766 の発見
- 「RB 再活性化スクリーニング」を用いて」

青木 淳賢 (東北大学大学院薬学研究科)
「新規 GPCR 活性化測定法 TGF α 切断アッセイとその応用」

新家 一男 (産業技術総合研究所)
「我が国のノウハウを結集した世界最大級の天然物ライブラリーとその運用」



広野 修一 (北里大学)
「イン・シリコ創薬技術に基づいた代謝酵素研究の実際」

早乙女 秀雄 (iPS アカデミアジャパン株式会社)
「iPS 細胞と創薬: 現状と今後の展開」



Peng Yin (Harvard, USA)
"Programming Nucleic Acids Self-Assembly"

Laurent Blanchoin (CNRS, France)
"Directed actin self assembly and contractility"



Timothy Gardner (Amyris)
"Synthetic biology: its evolution from simple circuits to the industrial production of tires, fuels and cosmetics"



John Overington (ChEMBL)
"ChEMBL: An Open Database for Drug Discovery"

本間 光貴 (理化学研究所)
「hEMBL データに基づいた置換基・骨格変換アイデア創出システム」





Rajiah Aldrin Denny (Pfizer Inc.)

"Selectivity and Physicochemical Properties Trends in Kinase Inhibitors"

石原 司 (アステラス製薬株式会社)

「多次元 ADMET 最適化を指向した Matched Molecular Pair 探索に基づく知識共有」

広川 貴次 (産業技術総合研究所)

「タンパク質 - ペプチド相互作用の分子モデリングと低分子化へ向けて」



藤谷 秀章 (東京大学先端科学技術研究センター)

「分子動力学を用いた抗体医薬の開発」

水島 徹 (慶應大学)

「DR の 現状と展望」



夏目 徹 (産業技術総合研究所)

「分子プロファイリングから展開する DR」

塩村 仁 (ノーベルファーマ株式会社)

「医薬品開発の今後 - アンメットニーズ医薬品開発と DR への期待 -」



永井 美之 (理化学研究所)

「感染症国際共同研究の新しい形 : J-GRID」

朴 三用 (横浜市立大学大学院生命医科学研究科、神奈川科学技術アカデミー (KAST))

「インフルエンザ RNA ポリメラーゼの構造による新規抗ウイルス剤の探索」



石川 智久 (理化学研究所)

「高病原性鳥インフルエンザ H5N1 の迅速検出法と新規治療法の臨床応用」

荒川 和晴 (慶應大学)

「パーソナルゲノム時代のリテラシー教育」



山崎 義光 (株式会社サインポスト)

「多項目遺伝子検査をもちいた生活習慣病予防プログラムとその生活習慣改善効果」

荻島 創一 (東北大学)

「東北メディカル・メガバンク事業におけるゲノム・オミックス情報と医療情報等の統合」



◆◆◆ フォーカストセッション報告 ◆◆◆

「生体分子認識における構造と相互作用の制御」ポスター口頭発表 第 5 分野

◇ 10 月 29 日 (火) 14:00-15:30 403 号室

10 月 29 日 (火) 14:00-15:30 に 403 号室を会場として分野 5 のフォーカストセッション「生体分子認識における構造と相互作用の制御」を開催した。参加者は 20 名程度だった。分野 5 のカバーする領域は広いが、今回は特に、タンパク質、DNA、RNA などの生体分子における分子認識機序の解明とその応用に向けた最近の進展を、構造と相互作用の制御の観点から、気鋭の研究者 3 名により報告していただくこととした。

九州大学 (現・富山大学) の井川善也氏には「Installation of orthogonality to the interface that assembles two modular domains in the Tetrahymena group I ribozyme」、京都大学の今西未来氏には「Molecular

evolution of a TALE protein to change DNA binding manner」、田辺三菱製薬の藤野泰寛氏には「Robust in vitro affinity maturation strategy based on interface-focused high-throughput mutational scanning」というご演題でそれぞれ、リボザイム、タンパク質-DNA 系、ペプチド結合系を対象とした相互作用の分子メカニズムに基づく合理的設計の事例をご紹介いただいた。

これらの話題は、人工的な制限酵素や転写因子、抗体設計といった応用を考える上でも重要であり、各発表後、活発な質疑応答と議論が行われた。

(モデレーター: 田中 成典 (神戸大学))

「情報化学の生命科学応用・若手の会プレ会」

◇ 10 月 29 日 (火) 16:00-17:30 402 号室

プログラム

1. 日本化学会情報化学部会のご紹介
2. 学会誌 CICSJ, JCAC のご紹介
3. 2013 年度情報化学討論会のご案内

4. 第 1 回情報化学若手の会へのお誘い
5. ケモインフォマティクス秋の学校のご案内

(モデレーター: 河合 隆利 (エーザイ株式会社)、
金子 弘昌 (東京大学工学系研究科))

「創薬等 PF バイオインフォマティクス領域での創薬支援の紹介」

◇ 10 月 30 日 (水) 10:00-11:30 4 階研修室

CBI 学会 2013 年大会の大会 3 日目 (10/30) にフォーカストセッションとして、「創薬等 PF バイオインフォマティクス領域での創薬支援の紹介」が開催されました。このセッションでは、2012 年からスタートした文部科学省の創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業の概要について紹介するとともに、特にバイオインフォマティクス、シミュレーション、インシリコスクリーニングなどの技術を広く日本の研究機関に開放・支援するグループ (バイオインフォマティクス領域) の研究内容や支援事例を詳しく説明しました。

演者として、清水謙多郎先生 (東大)、広川貴次先生 (産総研)、池口満徳先生 (横浜市大) と本間 (理研) の 4 名が登壇し、実際の支援において工夫した点などをざっくばらんにお話しいただきました。事前の宣伝などを行っていませんでしたが、62 名という多くの参加者の皆様にお集まりいただくことができ、大変盛況なセッションとなりました。質疑では、近年のオープン

イノベーションの高まりから製薬企業の研究者が共同研究や支援依頼を行う場合の進め方や研究成果の扱いについて質問があり、その他、科学的な内容についても活発に議論が行われました。このセッションをきっかけに、共同研究が始まった事例もあると聞いており大変有意義な会となりました。

(モデレーター: 本間 光貴 (理化学研究所))



「オミックス解析における実務者意見交換会」

◇ 10月30日(水) 13:30-15:00 403号室

本セッションは、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に精力的に携わっている研究者の忌憚のないご意見を頂戴し、問題意識の共有やブレークスルーの可能性についてのブレインストーミングを行う場を提供することを主旨として企画した。

東京大学の門田幸二先生には、マクロアレイと次世代シーケンシングのそれぞれの長所や問題点について、実際に解析に携わっているご経験をもとにご講演いただいた。長崎大学の三嶋博之先生には、次世代シーケンシングによる疾原因遺伝子探索において、データ解析でネックとなる部分(例えば非コード領域の変異の解釈など)、具体的な例をお示しいただいた。また九州大学の山西芳裕先生には、異なる種類のオミックスデータを統合的に扱うための解析フレームワークについてご発表いただいた。

会場からは活発なご発言をいただき、5分間の質疑応答では足りずにセッション終了後も先生方と議論される方の姿が目立った。

また参加者は35人前後であり、当初想定 of 25名収容の会議室では入りきれず、多くの方にご興味を持っていただいていることを実感した。そのため、2014年度はもう少し規模を拡大して企画したいと考えている。

なお、自分にとって座長の経験は初めてであったが、演者の先生方や事務局の皆様のバックアップのおかげで、不手際がありつつも成功を収めることができた。ご協力いただいた皆様方、およびご参加いただいた方に、末筆ながら感謝申し上げます。

(モデレーター：茂柳 薫(東京医科歯科大学)、
神田 将和(埼玉医科大学))

「フラグメント分子軌道法の最近の展開：実利用へ向けた開発と応用」 ポスター口頭発表 第1分野

◇ 10月30日(水) 13:30-15:00 4階研修室

第一分野のフォーカストセッションは、「フラグメント分子軌道法の最近の展開：実利用へ向けた開発と応用」というタイトルで、大学関係者だけではなく企業からの参加者も迎え、大会三日目に開催されました。まず、渡邊千鶴さん(東大生産研)には、計算で得られた電子密度をX線結晶解析に利用する研究について発表して頂き、構造生物学におけるFMO法の実利用へ向けた試みについて紹介して頂きました。次に、神戸大学の大学院生である蔵内亮さんに、フラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)を、リガンド分子の類似性を考慮して二次元マップ化するアイデアを説明してもらい、*de novo*創薬への応用の

可能性まで議論することができました。

また、FMOプログラムABINIT-MPの開発に携わっている沖山佳生さん(東大生産研)には、主に、次世代スパコン「京」への対応について発表して頂き、FMO法の並列適性、さらには現段階での課題などが議論されました。

最後に、本セッションのモデレーターである石川岳志(長崎大学)が、最近の応用計算例を紹介し閉幕となりました。いずれの発表でも活発な議論が繰り広げられ、FMO法の今後の発展に大きな期待がよせられていると感じさせるフォーカストセッションだったと思います。

(モデレーター：石川 岳志(長崎大学))



「バイオンフォマティクスの医学応用 個別化予防・医療に向けたバイオンフォマティクスと情報学の接点」

◇ 10 月 30 日 (水) 30 日 15:30 -17:00 4 階研修室

河合 純 (理化学研究所 予防医療・診断技術開発プログラム)

2. コホート研究と医療情報

- 大規模出生コホート研究における医療情報の展望

水野 聖士 (東北大学医学系研究科)

3. 医療情報による薬剤投与とパターンの解析 - 心不全と腎不全の

併発に対して行われる投薬パターンの解析

森田 瑞樹 (産業技術総合研究所)

4. 医療情報の言語処理 - 医療分野の言語処理と

全自動言語処理プラットフォーム Kachako

狩野 芳伸 (科学技術振興機構 さきがけ)

5. 患者参加型の医療・医学研究

- 患者中心の患者情報登録の設計と課題

森田 瑞樹 (産業技術総合研究所)

問題意識の共有やブレークスルーの可能性についてのブレインストーミングを行う場となった。また、こうした問題を共有する研究者間での親睦をはかり、バイオンフォマティクスと医療情報学の接点となる場となった。

(モデレーター: 荻島 創一 (東北大学メディカル・メガバンク機構)、森田 瑞樹 (産業技術総合研究所))

バイオンフォマティクスの医学応用として、個別化予防・医療に向けたバイオンフォマティクスと医療情報学の接点というフォーカストセッションを開催した。シーケンス技術の急速な発展にともないパーソナルゲノムの時代は目前であり、いずれパーソナルオミックスの時代が到来すると考えられ、パーソナルゲノムに基づく個別化予防、パーソナルオミックスに基づく発症前の先制医療と発症後の個別化医療の、新しい医療への期待が高まっている。こうした新しい医療の実現に向けて、国内外で、個別化予防においてはコホート研究、先制医療・個別化医療においてはバイオマーカー探索、医療情報解析が進展している。これらの研究の実現には、ゲノム情報、オミックス情報の解析のみならず、医療情報と医療情報からの有用な情報の抽出と解析が重要となる。

本セッションでは、コホート研究と個別化予防、バイオマーカー探索と先制医療・個別化医療、医療情報解析、そして新しい医療の時代において重要となる参加患者型の医療・医学研究について、5 人の演者にご講演いただいた。

1. バイオマーカー探索と予防医療

- 予防医療におけるバイオマーカー探索



「医薬品開発におけるトランスレーショナル・リサーチの強化とその戦略」

◇ 10 月 30 日 (水) 15:30-17:00 402 号室

医薬品開発の戦略と方法は 21 世紀になってから大きく変遷しつつある。近年クローズアップされている個別化医療、コンパニオン診断薬などに代表されるように、ファーマコゲノミクスのデータに基づいて薬理効果の期待できる患者を特定し、副作用リスクを回避することが一般的になりつつある。

また一方、ヒト iPS 細胞をもちいた開発候補化合物の薬理・毒性評価法の開発は、前臨床と第 1 相臨床試験のギャップを橋渡しする上で極めて重要になると期待されている。そのような観点から、「医薬品開発におけるトランスレーショナル・リサーチの強化とその戦略」と題したフォーカストセッションを開催した。まず、理化学研究所・ライフサイエンス技術基盤センターの石川智久が、彼等のトランスレーショナル・リサーチにおいて、NRF2 遺伝子の上流域に存在する SNP (−617C>A) が、MDM2 遺伝子と協調的に働いて、肺癌患者の癌進行度および治療後の生存率に関係する事を明らかにした。

次いで、理化学研究所・統合生命医科学研究センターの筵田泰誠が全ゲノム領域の SNP を対象とした GWAS 解析の一例として、日本人におけるカルバマゼピン誘発薬疹の発症リスクと関連するゲノムバイオマーカー HLA-A*31:01 及びその遺伝子検査の医学的有用性を検証する GENCAT Study を紹介した。

最後に、第一三共株式会社・安全性研究所の三分一所厚司が、iPS 細胞を用いた心臓毒性評価の共同研究について最近の動向を紹介した。ヒト iPS 細胞を用いた心臓毒性評価の有用性が期待されている中、iPS 細胞は細胞自体のバラツキ、培養方法の問題等、各研究機関や企業の研究所においては評価法が検討されている。そこで世界標準化を目指して、ヒトにおける催不整脈作用をより効果的に予測する方法を模索するために共同研究を提案し活動を開始したことを説明した。日本が世界に対して新しい技術と知識のシグナルを発していく戦略について、参加者とともに話し合っ、極めて有意義な意見交換ができた。

「化合物ライブラリー構築」

◇ 10 月 31 日 (木) 13:30-15:00 4 階研修室

(モデレーター: 石川 智久 (理化学研究所))

HTS (ハイスループットスクリーニング) が広く行われるようになって 15 年以上が経過したが、化合物ライブラリーをどう構築するかは常に大きな課題である。数多くの化合物を集めるだけではなく、スクリーニングとその後の創薬方針に応じた「ライブラリー構築」が求められている。

本セッションでは、国内外より二人の講師を招いて、様々なライブラリー構築の取組みについて講演をいただいた。セッション当日は約 50 名を越える参加者があり、関心の高さが伺われた。

まず、第一三共株式会社の木村陽一さんより、PPI やフェノタイプアッセイ、フラグメントベースドアッセイを念頭においた独自のケミカルライブラリーについて、その考え方や実際の

取組みについての紹介があった。

二人目の演者は英国バイオフォーカス社のリチャード・ヒルさんで、バイオフォーカス社がこれまで取り組んできた、キナーゼや GPCR 等のフォーカスライブラリーについての成功事例について紹介があった。更に、現在取り組んでいるライブラリーとして、PPI やフェノタイプアッセイを念頭においた、蛋白質のヘリックス構造等をミミックしたスキャフォールドライブラリーの構築等について、そのライブラリー設計における考え方などの紹介をいただいた。

本セッションを通じて、化合物ライブラリーには、単に不適化合物を排除して多様性を求めるだけではなく、例えば生体内での相互作用を念頭におくなどの積極的なライブラリー構築の重要性が再確認されたものと思われる。



「第一原理計算とメタボロミクス：予測と実証」

◇ 10 月 31 日 (木) 13:30-15:00 402 号室

(モデレーター: 新井 好史 (大正製薬株式会社))

2013 年 10 月 31 日にタワーホール船堀にて、標題のフォーカストセッションを開催しました。学会最終日の午後という状況の中、15 名を超える参加者にお集りいただきました。緒に就いたばかりの研究分野ながら、その関心の高さに驚きました。

なお本セッションでは以下の先生方にご講演いただきました。

1. 草野 都 先生 (理研・CSRS)

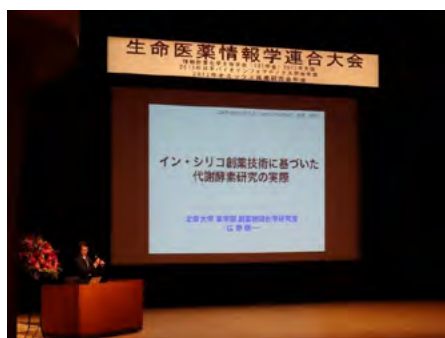
「植物の生産する代謝物群の物理化学的性質に着目した新規手法の開発」

2. 立川 仁典 先生 (横浜市大), 川島 雪生 先生 (理研・AICS)

「植物の生合成代謝経路や光防御機構の解明のための量子化学計算アプローチ」

近年、質量分析計や NMR による生体内の代謝物に関する網羅的なデータ (メタボロームデータ) が迅速に得られるようになり、病気の診断や組換え植物種の化学的多様性評価などに用いられています。一方、第一原理にもとづいて生体分子の物性と機能を予測する研究も進展しています。この第一原理計算による予測の導入により、従来とは異なる視点でのメタボロームデータ解釈とその実証とが期待できます。

本セッションでは、メタボローム分析技術と第一原理計算の現状を俯瞰し、代謝物の物理化学的特性予測値とメタボロームデータとの統合研究の発展について有益な議論が行われました。最後に、ご講演くださった先生方、ご参加いただきました学会員の皆様、CBI 学会 2013 年大会関係者および CBI 学会事務局の皆様にご場を借りまして厚く御礼申し上げます。



「インシリコ創薬」ポスター口頭発表 第 2 分野

◇ 10 月 31 日 (木) 13:30-15:00 403 号室

(モデレーター: 福島 敦史 (理化学研究所))

今回の第 2 分野: インシリコ創薬のフォーカストセッションは、口頭発表可で投稿された 4 件のポスターの口頭発表という事で、其々のポスターに興味を持たれた方々とのディスカッションが中心であった。次回は、第 2 分野としてテーマを決めたセッションの企画も考えている。

1. Toward Crowdsourcing Evaluation of Synthetic Accessibility (Yukino Baba: The University of Tokyo)

2. Protein-Ligand Docking Using Artificial Bee Colony Algorithm (Shota Uehara: Kobe University)

3. CzeekD: Fragment-based de novo Drug Design System for Drug Discovery (Tatsuya Yoshikawa: Kyoto Constella Technologies Co., Ltd.)

4. Mixed Fragment-based screening of WNK1 inhibitor (Yukio Tada: The University of Tokyo)

(モデレーター: 多田 幸雄

(東京大学創薬オープンイノベーションセンター))

「FMO 法の創薬への適応例とその展望 (第 6 回 FMO 研究会)」

◇ 10 月 31 日 (木) 15:30-17:00 4 階研修室

CBI 学会の第 6 回 FMO 研究会として、フラグメント分子軌道法に関するフォーカストセッションを開催した。大会最終日、最後のセッションにも関わらず、研修室がほぼ満席の盛況で研究者の方々の FMO 法への興味の高さが窺えた。内容は「FMO 法の薬物設計への応用」というテーマで、日本化学会情報化学部会誌 Vol.31 (2013) No.4 (https://www.jstage.jst.go.jp/browse/cicsj/31/4/_contents/-char/ja/) に執筆頂いた先生方から、以下の様な演題の講演があり実際の創薬に関わる熱心なディスカッションがなされた。

今回のフォーカストセッションを契機に、今後の FMO 研究会を含めてよりテーマを企画を考えている。

1. セリンプロテアーゼ阻害剤における FMO による阻害メカニズムの考察 (上村みどり: 帝人ファーマ株式会社)
2. プロリン誘導体のタンパク質との相互作用 (小沢 知永: キッ セイ薬品工業株式会社)
3. ABINIT-MP/BioStation による FMO 法の創薬への適用 (福澤 薫: みずほ情報総研株式会社)
4. フラグメント分子軌道法による SAR 解析と分子設計への期待 (森 健一: アステラス製薬株式会社)
5. リガンド - タンパク結合自由エネルギーの見積もりと FMO (市原 収: シュレーディングラー株式会社)

(モデレーター: 多田 幸雄

(東京大学創薬オープンイノベーションセンター))





新学術領域「分子ロボティクス」 公開シンポジウム

新学術領域分子ロボティクスとの共催により、公開シンポジウムを開催した。

キーノートスピーカーとして、Prof. Peng Yin (Harvard, USA)、Prof. Laurent Blanchoin (CNRS, France) をお招きし、Gel-based Molecular Robots, Molecular Robotics Theory and Practice, Self assembling and DNA logic gates の3つのセッションを開催した。

Program

Keynote (Oct. 30th 10:00-11:30)

- ◆ Peng Yin (Harvard, USA): Programming Nucleic Acids Self-Assembly
- ◆ Laurent Blanchoin (CNRS, France): Directed actin self-assembly and contractility

Gel-based Molecular Robotics (Oct. 29th (Tue) 14:00 – 15:30)

- ◆ Hiroshi Morita, Hiroshi Morita, Yusuke Hara: Modeling and Simulation of self oscillating gel – toward a molecular gel robot
- ◆ Hitoyuki Mayama, Yusuke Hara: Spatio-temporal change of BZ gel
- ◆ Ibuki Kawamata, Satoshi Murata, Masami Hagiya: Toward Spatial and Temporal Gel-Sol Transition of Hydrogel Driven by DNA Hybridization Reaction
- ◆ Jin Gong, Takahiro Hazama, Masanori Arai, Shota Murata, Yosuke Watanabe, Masato Makino, M. Hasnat Kavir, Hidemitsu Furukawa: Smart Lenses Created with Transparent Shape Memory Gels

Oct. 29th (Tue) 16:00 – 17:30 Molecular Control Theory and Practice

- ◆ Tamiki Umeda: Numerical Studies of Protein-induced Shape Changes of Liposomes
- ◆ Fukuhito Ooshita, Shusuke Takatsu, Hirotsugu Kakugawa, Toshimitsu Masuzawa: Simple Local-information-based Self-optimizing Algorithms in Grid Networks
- ◆ Takashi Nakakuki, Jun-ichi Imura: A study on controller structure of biochemical reaction networks
- ◆ Naohiko Shimada, Wei Song, Atsushi Maruyama: Acceleration of DNA strand exchange reaction by cationic comb-type copolymers

Oct. 31st (Thu) 10:00 – 11:30 DNA and Lipid-based Molecular Robotics

- ◆ Masato Ikeda: Heat-induced Morphological Transformation of Supramolecular Nanostructures
- ◆ Yuno Natsume, Taro Toyota: Construction of Giant Vesicle Containing Microspheres at High Volume Fraction and Its Transformation
- ◆ Takashi Nukada, Koh-ichiroh Shohda, Akira Suyama: Dynamic biomolecular computing system for artificial genetic network
- ◆ Yuexing Han, Hara Akito, Akinori Kuzuya, Ryosuke Watanabe, Yuichi Ohya, Akihiko Konagaya: Towards an Automatic Recognition of DNA Nanostructures on AFM Images

**The 1st International Conference ◆新学術領域「合成生物学」公開シンポジウム◆
of Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas
"Synthetic Biology for the Comprehension of Biomolecular Networks"**

In order to make the paradigm shift from the concept of "watched and analyzed biology" to that of "synthetic and analyzed or utilized biology", the innovative research named Synthetic Biology was started from 2000 in US, such as designing synthetic genetic circuit by combining known interrelated biomaterials, realizing a certain bio-functional behaviors such as switch, oscillation, *in vivo*, designing synthetic metabolic pathways by incorporating enzyme coded genes from other origins into the cells. However, these attempts have been done on a small scale and with a trial-and-error method. On the basis of this research background, the grant-in-aid for scientific research on innovative areas (research in a proposed research area), "Synthetic Biology for the Comprehension of Biomolecular Networks" was started from 2011. The objectives of this research project is to establish the coordination between the fundamental technologies for synthetic biology in

order to comprehend biomolecular networks by integrating the following three missions: 1) design synthetic genetic circuit or metabolic pathway with using the methods of computational science, 2) construct the circuit *in vitro* with using the method of engineering, 3) construct the circuit *in vivo* or in the cell with using the methods of molecular biology.

In order to construct and control a large scale of dynamic and complex synthetic genetic circuit or metabolic pathways. The fundamental technologies for synthetic biology are essential as shown in Fig. 1. In the first stage (2-3 years), our mission is to construct dynamic and multi-elements synthetic genetic circuit, followed by the construction of differentiation-induced system against stem cell and by the realization of cell factory in the last 2-years. At this international symposium, the hot issues and expected research achievements of "Synthetic Biology" will be introduced.

- ◆ Construction of metabolic pathways that are comprised of multi-genes by operon strategy
Kenji Tsuge (Institute for Advanced Biosciences, Keio University)
- ◆ Developing frameworks for evolving biological networks with various characteristics
Hitoshi Iba (The University of Tokyo)
- ◆ Spatiotemporal dynamics in synthetic reaction networks
Yannick Rondelez (The University of Tokyo)



チュートリアル

FMO チュートリアル

創薬研究に役立つ機能の紹介と 新開発の FMO 計算支援ソフト
"FU" と GAMESS を用いた計算実習

CBI 学会 / FMO 研究会 主催

日時: 2013 年 10 月 28 日 (月) 13:30-17:30

場所: タワーホール船堀 401

講師: 北浦和夫 (神戸大学)、Dmitri G. Fedorov (産業技術総合研究所)

プログラム:

1. 講義 (13:30 ~ 15:10)
FMO 法の説明
創薬で役立つ機能 (部分構造最適化、溶媒モデル等) の説明
GAMESS-FMO の説明
2. 実習 (15:20 ~ 17:00)
FMO 計算支援ソフトウェア「FU」の機能と使い方
モデル系を用いた様々な FMO 計算の実習
タンパク質 - リガンド複合体モデルの計算と結果のグラフ化
3. 質疑応答 (17:00 ~ 17:30)

NGS データ解析入門

SNP 解析 ~ 癌ゲノム解析まで

株式会社ジナリス

日時: 2013 年 10 月 28 日 (月) 16:00-18:00

場所: タワーホール船堀 4階研修室

次世代シーケンシングのデータ解析初心者の方を対象に、解析目的ごとに適した解析ツールの紹介、各解析段階での QC 方法や注意点など、NGS データを手にしたときに知っておきたい様々なことについて紹介

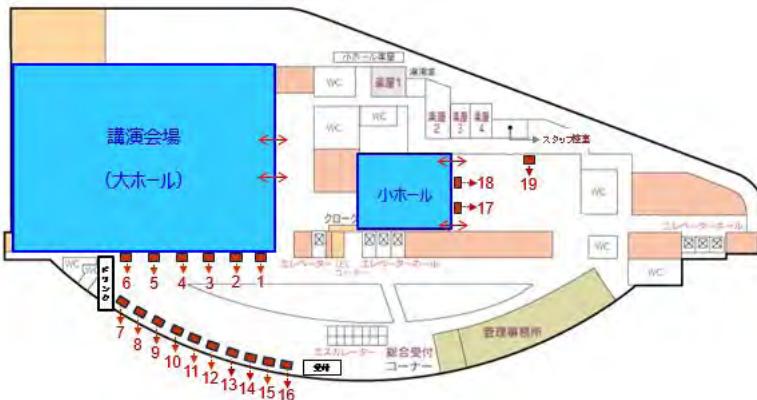
実験条件編: 解析アプリケーション入門

NGS データ解析の対象となる各種解析アプリケーション (Exome-seq など) と、データ解析に影響を与えるシーケンス実験のオプションに焦点をあてる

解析ツール編: 目的別解析ツールのご紹介 一般的な変異解析から癌ゲノム解析まで、各種解析ツールやその選び方など

企業展

ブース出展企業一覧	ブース No.
株式会社ワールドフュージョン	1
トムソン・ロイター	2
コンプレックス株式会社	3
アクセルリス株式会社	4
シュレーディング	5
インフォコム株式会社	6
株式会社菱化システム	7
株式会社タロウ	8
株式会社医学生物学研究所	9
株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ/ 株式会社アフィニティサイエンス	10
神戸HPCクラスター/FOCUS (計算科学振興財団)	11
iPS アカデミアジャパン株式会社	12
東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター	13
一般社団法人 バイオ産業情報化コンソーシアム	14
株式会社ナベ インターナショナル	15
ライフテクノロジーズジャパン株式会社	16
沖縄科学技術大学院大学 (OIST)	17
株式会社日立ソリューションズ	18
バイオサイエンスデータベースセンター, JST/ ライフサイエンス統合データベースセンター, ROIS	19



広告掲載企業一覧
キコーテック株式会社
パトコア株式会社
一般社団法人 化学情報協会
株式会社菱化システム
神戸HPCクラスター/ FOCUS (計算科学振興財団)
カタログ設置
株式会社ファルマデザイン

セッション	出展企業	Room	開催日時
LS	イルミナ株式会社	407	10月30日(水)11:30-12:30
LS	NGS 現場の会 sponsored by 三井情報株式会社	401	10月31日(木)12:00-13:00
OS	大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCI 戦略分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム	401	10月31日(木)10:00-11:30
TS	株式会社ジナリス	研修室	10月28日(月)16:00-18:00
LS	株式会社榎本チエイン	福寿	10月31日(木)12:00-13:00
LS	株式会社DNAチップ研究所	407	10月29日(火)12:00-13:00
OS	東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター	401	10月29日(火)14:00-15:30
OS	東北大学 東北メディカル・メガバンク機構	401	10月31日(木)13:30-15:00
LS	トミーデジタルバイオロジー株式会社	桃源	10月29日(火)12:00-13:00
LS	株式会社ナベ インターナショナル	福寿	10月29日(火)12:00-13:00
SS	日本動物実験代替法学会	桃源	10月31日(木)13:30-15:00
LS	株式会社パーキンエルマー・ジャパン	桃源	10月31日(木)12:00-13:00
LS	パトコア株式会社	福寿	10月30日(水)11:30-12:30
SS	みずほ情報総研株式会社 (SS)	福寿	10月31日(木)13:30-15:00
OS	ライフサイエンス統合データベースセンター, ROIS	小ホール	10月31日(木)10:30-12:00
LS	ライフテクノロジーズジャパン株式会社	401	10月29日(火)12:00-13:00
LS	株式会社ワールドフュージョン	桃源	10月30日(水)11:30-12:30

LS: ランチョンセミナー、SS: スポンサーセッション、TS: チュートリアル、OS: オーガナイズドセッション

ポスター発表

ポスター賞

Best Poster

◆ C-2-01 Shota Uehara

Title: Protein-Ligand Docking Using Artificial Bee Colony Algorithm

Author: Shota Uehara, Kazuhiro Fujimoto, Shigenori Tanaka

Excellent Poster

◆ C-1-07 Yoshiaki Tanida

Title: Standard binding free energy calculation for theophylline-RNA aptamer system: alchemical transformation and metadynamics

Author: Yoshiaki Tanida, Takashi Mitsui

◆ C-5-19 Hirofumi Nakano

Title: Discovery of a Potent and Selective FLT3 Kinase Inhibitor by Fragment Evolution

Author: Hirofumi Nakano, Nae Saito, Hirotsu Kojima, Takayoshi Okabe, Tetsuo Nagano

◆ C-5-25 Akifumi Nishida

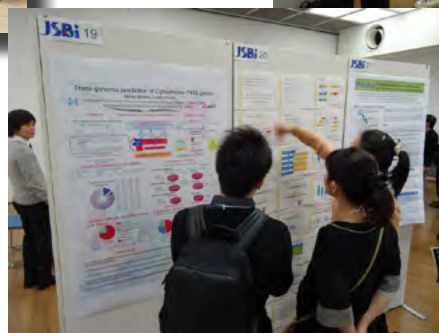
Title: Dynamical control of protein concentration using synthetic two-component system

Author: Akifumi Nishida, Ryoji Sekine, Daisuke Kiga, Masayuki Yamamura

◆ C-5-48 Ibuki Kawamata

Title: Toward Spatial and Temporal Gel-Sol Transition of Hydrogel Driven by DNA Hybridization Reaction

Author: Ibuki Kawamata, Satoshi Murata, Masami Hagiya



委員会報告

Committee

【総会】

2013 年度 情報計算法学生物学会（CBI 学会）総会

日時：2013 年 10 月 29 日（火） 17:30 - 18:00

場所：タワーホール船堀 大ホール（東京都江戸川区船堀 4 - 1 - 1）

出席者：12 名

資料：(1) 前事業年度の事業報告書

(2) 前事業年度の活動計算書

(3) 前事業年度の貸借対照表

(4) 前事業年度の財産目録

(5) 前事業年度の年間役員名簿

(6) 前事業年度の末日における社員のうち 10 人以上の者の氏名（住所は除く）

議事：NPO 情報計算法学生物学会の事業活動に関する報告

【評議員会】

第 2 回評議員会

日時：2013 年 10 月 29 日（火） 18:00 - 19:00

場所：タワーホール船堀 4 階 研修室（東京都江戸川区船堀 4 - 1 - 1）

出席者（敬称略）：田中 博、石川 智久、磯野 克己、岡部 隆義、片倉 晋一、河合 隆利、小長谷 明彦、多田 幸雄、藤 博幸、
中井 謙太、中田 吉郎、本間 光貴、水間 俊、美宅 成樹、小澤 陽子（事務局）

欠席（敬称略）：相田 美砂子、一石 英一郎、岡本 正宏、岡崎 康司、古明地 勇人、菅原 秀明、杉山 雄一、高岡 雄司、田中 成典、
中馬 寛、富田 勝、西沢 元仁、広野 修一、船津 公人、望月 祐志、山内 あい子

資料：第 1 回評議員会（4 月 22 日）からの経過報告

議題：(1) 評議員選挙の見直しについて

(2) 会長選挙の見直しについて

【CBI ジャーナル編集委員会】

2013 年度 第 2 回編集委員会

日時：2013 年 10 月 29 日 (火) 12:00 - 13:00

場所：タワーホール船堀 402 会議室 (東京都江戸川区船堀 4 - 1 - 1)

出席者 (敬称略) : 望月 祐志、石川 岳志、中田 吉郎、宮本 秀一、片倉 晋一、河合 隆利、多田 幸雄、中馬 寛、平山 令明、
広川 貴次、福澤 薫、田中 博、福島 敦史、茂櫛 薫、石川 智久、石田 誠一、粕谷 敦、本間 光貴、水間 俊、湯田 浩太郎、
小長谷 明彦、田中 成典、萩谷 昌己、山村 雅幸、小宮山 直美 (事務局)

資料：(1) 2013 年度 CBI ジャーナル 論文投稿・刊行状況一覧
(2) CBI 学会誌創刊号 (大会受付にて冊子体を配布)
(3) 2013 年度 J-STAGE 利用学協会説明会報告
(4) CBI 学会誌第 2 号案 (2013 年 10 月 31 日付でウェブ上で公開。ドラフト版を編集委員会で回覧。)

報告事項：

- (1) 2013 年度 論文投稿の状況の報告
- (2) 学会誌発刊 (2013 年 7 月 31 日発刊) の報告
- (3) JSTAGE 動向とデータ全 XML 化 (2013 年度 J-STAGE 利用学協会説明会より)
- (4) BI ジャーナル投稿分野の再編にあたっての各分野長からの分野の説明

討議事項・提案事項：

- (1) CBI 学会誌第 2 号刊行について
- (2) CBI2014 年大会プログラム委員就任に関して
- (3) 次回の予定

【関西部会】

第 5 回関西部会運営委員会

日時：2013 年 11 月 15 日 (金) 10:00 - 12:00

場所：(財)都市活力研究所会議室 (大阪市北区大深町 3 - 1 グランフロント大阪 タワー C 7F)

出席者 (敬称略) : 田中 成典 (関西部会長、神戸大)、小長谷 明彦 (東工大)、坂田 恒昭 (塩野義製薬)、藤淵 航 (京都大)、
正城 敏博 (大阪大)、森 浩禎 (奈良先端大)、鶴田 宏樹 (神戸大)、志水 隆一 (都市活力研究所)、牛尾 (書記、神戸大)
欠席者 (敬称略) : 水口 賢司 (医薬基盤研究所)、早乙女 周子 (京都大学)、山崎 一人 (大日本住友製薬)、塩田 武司 (塩野
義製薬)、奥野 恭史 (京都大学)、木下 誉富 (大阪府立大学)

議題：(1) 4 月 11 日 (金) CBI 学会研究講演会 (グランフロント大阪) について
(2) 次々回 (2014 年 11 月か 12 月) CBI 学会関西部会講演会について
(3) 次回関西運営委員会について
(4) CBI 大会 (2013 年大会、2014 年大会) について
(5) 関西部会長の選出について

【2014 年大会 プログラム委員会】

2014 年大会 第 1 回プログラム委員会

日時：2013 年 12 月 26 日（木）13:20 - 15:00

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 501 号室（東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6）

出席者：（敬称略）：望月 祐志（立教大）、池森 恵（エーザイ）、石川 智久（理研）、石田 誠一（国立衛研）、大和田 智彦（東大院薬）、河合 隆利（エーザイ）、木賀 大介（東工大）、小長谷 明彦（東工大）、古明地 勇人（産総研）、佐藤 薫（国立衛研）、澤田 光平（エーザイ）、高岡 雄司（アクセルリス）、多田 幸雄（東大）、鶴淵 雄士（ソフィオンバイオサイエンス）、福島 敦史（理研）、福澤 薫（みずほ情報総研）、Paul Horton（産総研）、美宅 成樹（豊田理化学研究所）、森 寛敏（お茶の水女子大）、湯田 浩太郎（インシリコデータ）、小澤 陽子（事務局）、小宮山 直美（事務局）

*スカイプで出席：石川 岳志（長崎大）、荻島 創一（東北大）、水間 俊（松山大学）、山村雅幸（東工大）

欠席者（敬称略）：一石 英一郎（国際医療福祉大病院）、岡崎 康司（埼玉医科大）、岡部 隆義（東大）、粕谷 敦（第一三共）、片倉 晋一（第一三共）、小西 智一（秋田県立大）、櫻井 実（東工大）、Christian Schoenbach（九工大）、菅野 清彦（旭化成ファーマ）、杉山 篤（東邦大）、関野 祐子（国立衛研）、田中 成典（神戸大）、田中 博（東京医科歯科大）、中馬 寛（徳島大）、中田 吉郎（群馬大）、萩谷 昌己（東大）、平山 令明（東海大）、広川 貴次（産総研）、福井 一彦（産総研）、本間 光貴（理研）、宮本 秀一（崇城大）、森岡 涼子（国立情報学研）、森 泰生（京大）

議事：(1) 2014 年大会の基本方針の再確認

(2) 部屋割案

(3) プログラム

(4) メイン（大会企画分野）

(5) 分野毎の状況

(6) 全体調整と主トークの決定 / 確認

(7) 今後の調整予定

(8) その他案件

(9) スケジュール確認

2014 年大会

「iPS, ion channel, in silico が拓く、新しい創薬パラダイム」

日時：2014 年 10 月 28 日（火）- 30 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：CBI 学会 2014 年大会大会長：澤田光平（エーザイ株式会社）

CBI 学会 2014 年大会実行委員長：河合隆利（エーザイ株式会社）

大会 HP：<http://cbi-society.org/taikai/taikai14/index.html>

【執行部会】

第 9 回執行部会

日時：2013 年 10 月 9 日 (水) 18:30 - 20:15

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 506 号室 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：田中 博、片倉 晋一、岡部 隆義、多田 幸雄、本間 光貴、望月 祐志、水間 俊、小長谷 明彦、小澤 陽子 (事務局)

欠席者 (敬称略)：河合隆利、高岡雄司、田中成典

資料：(1) NPO 情報計算化学生物学会の事業活動に関する報告 (回覧)

(2) 第 2 回評議員会議題 (案)

(3) ロゴ投票結果

議題：(1) 2013 年度 情報計算化学生物学会 (CBI 学会) 総会について

(2) 評議員会の議題について

(3) 新ロゴについて

第 10 回執行部会

日時：2013 年 12 月 11 日 (水) 18:15 - 20:45

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 506 号室 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：田中 博、岡部 隆義、河合 隆利、高岡 雄司、多田 幸雄、水間 俊 (スカイプで参加)、望月 祐志、小長谷 明彦、小澤 陽子 (事務局)

欠席者 (敬称略)：片倉 晋一、田中 成典、本間 光貴

資料：(1) 損益計算書 (2013 年 12 月 9 日現在)

(2) 2013 年研究講演会参加者人数及び収支

(3) CBI 学会における退職金の積み立てについて

(4) 2013 大会決算 (2013 年 12 月 9 日現在)

(5) JSBi との費用分担 (内訳)

(6) 2013 大会全体、フォーカストセッション、チュートリアル参加者数一覧

(7) 2014 大会予算案

(8) 2014 大会出展募集要綱 (案)

(9) 2014 会場施設利用料金見積書

(10) 2014 大会会場枠とセッション案

(11) 20131029CBI 学会総会議事録 (案)

(12) CBI 学会規約

(13) 2013 年 10 月 29 日評議員会議事録

(14) 2013 年 11 月 15 日関西部会議事録

(15) 講演会予定一覧

(16) 特別講演講師案

(17) 追加執行部会メンバー案

議題：(1) 2013 年度収支見込

(2) 退職金の積み立てについて

(3) 2013 年度大会の収支見込

(4) 2014 年度大会および連合大会 (東北) の現状

(5) CBI 学会総会の定足数について

(6) 評議員会報告と選挙延期に関する意見交換

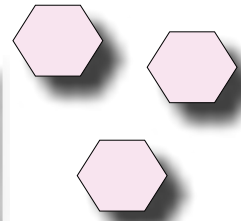
(7) 関西部会の活動報告

(8) 研究講演会の活動状況、来年の予定および特別講演候補

(9) 執行部会メンバーの追加について



研究講演会 記録



第 343 回 CBI 学会研究講演会

「海外の事例に学ぶ、新しい形の産官学連携」

開催趣旨：

創薬研究においても、オープンイノベーションやプレコンペティティブなどの概念が注目され、従来型の特定の企業と大学研究室が共同研究契約を結ぶといったタイプとは異なる産官学連携が模索されている。例えば、NCATS（米国立先進トランスレーショナル科学センター）では、8つの製薬企業が臨床試験で脱落させた化合物 58 種についてその化合物の再利用のため適応症の再目的化を推進するプロジェクトを開始している。本講演会では、米国、英国での産官学連携に直接のご経験をお持ちの講師からお話を伺うことで、日本の創薬・医療における新しい形の産官学連携を考えるきっかけとしたい。

日時：2013 年 11 月 15 日（金）13:25 - 17:45

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル タワー B 10 階 カンファレンスルーム B05-B07
（大阪市北区大深町 3 - 1）

世話人：水口 賢司（医薬基盤研究所）、森 浩禎（奈良先端科学技術大学院大学）、藤瀨 航（京都大学）

プログラム：

- (1) 13:25 - 13:30 開催の挨拶
- (2) 13:30 - 14:30 「米国におけるベンチャーの立ち上げと育成方法—米国での再生医療 ベンチャーの立ち上げの経験から—」
城戸 常雄（Stem Cell Medicine LLC, President & CEO）
- (3) 14:30 - 15:30 「新規開発がん診断・治療法：臨床応用に即した開発方針と治験への道筋」
小林 久隆（米国立がん研究所, 分子イメージングプログラム, チーフ・サイエンティスト）
- (4) 15:50 - 16:40 「欧州における産学連携の現状 = ビッグファーマの多くが参加するコンソーシアム EBI Industry programme を題材に =」
池田 和由（株式会社レベルファイブ）
- (5) 16:40 - 17:30 「企業内研究、国内産学連携および国際連携をどう組み合わせるか = 抗体創薬インフォマティクスを例に =」
白井 宏樹（アステラス製薬株式会社 分子医学研究所）
- (6) 17:30 - 17:45 まとめと総合討論



第 344 回 CBI 学会研究講演会

「医薬品開発におけるモデリング&シミュレーション (M&S) の有用性」

開催趣旨：

医薬品開発コストが急騰する中、その解消ツールの 1 つとして位置づけられた M&S は、今や新しいパラダイムを築きつつある。そのひとつは、雑多な情報の統合であり、その結果は確率とともに視覚的に示すことが可能になった。次の開発ステージへの Go/No go が数値をもって決定できる。大きな進歩は病態のモデルによる記述 (Drug Disease Model, DDM) に見ることができる。DDM により種々の異なる物差しで示された情報は統合され、バイオマーカーの探索も容易になった。DDM は病態進行のメカニズムと薬物作用点の解明のツールとなり、新たな学際領域、System Pharmacology が確立されようとしている。一方で *in vitro* および *in silico* の情報や技術を用いた予測法も大きな進歩を遂げ、生理学的薬物動態モデリング (PBPK) は医薬品開発のルーチンワークとなっている。しかし、こうした M&S 技術の目覚ましい進歩があっても、未だに *in vitro* 側からの予測技術と臨床側からの DDM が連結した、試験管から臨床までの効果・副作用の予測は実現していない。本シンポジウムでは、この両サイドから新技術のご講演をいただき、新パラダイム実現のヒントを探る。

日時：2013 年 12 月 10 日 (火) 13:20 - 18:50

場所：東京大学山上会館大会議室 (東京都文京区本郷 7 - 3 - 1)

世話人：杉山 雄一 (理化学研究所)、千葉 康司 (横浜薬科大学)

プログラム：

- (1) 13:20 - 13:30 はじめに
杉山 雄一 (理化学研究所)
- (2) 13:30 - 14:20 「取り込み、代謝、排泄過程を考慮した複雑な薬物間相互作用の予測：
PBPK モデルの有用性」
杉山 雄一 (理化学研究所)
- (3) 14:20 - 14:50 「臨床試験における薬物代謝酵素、トランスポーターの遺伝子多型の影響を予測する：
臨床試験による確認を最少にできるか？」
前田 和哉 (東京大学大学院薬学系研究科)
- (4) 14:50 - 15:15 「小児における薬物動態を PBPK モデルで予測する：
Adult から child への予測は可能か？」
米子 真記 (国立成育医療研究センター)、杉山 雄一 (理化学研究所)
- (5) 15:40 - 16:05 「*In vitro* データに基づく抗菌薬の薬効予測；PK/PD モデル解析 - 薬効を適切に
評価できる指標の論理的探索 -」
北村 嘉章 (杏林製薬)
- (6) 16:05 - 16:30 「生理学的薬物速度論モデルによるボセンタンの薬物動態解析 ～非線形薬物動態、
自己代謝能誘導、薬物間相互作用～」
佐藤 正延 (医薬品医療機器総合機構)
- (7) 16:30 - 17:10 「臨床開発におけるモデリング&シミュレーション」
貝原 徳紀 (アステラス製薬)
- (8) 17:25 - 18:05 「前臨床の結果および探索的臨床試験の結果を基にして臨床試験の結果を予測する：
個人間変動を考慮した解析」
千葉 康司 (横浜薬科大学)
- (9) 18:05 - 18:50 総合討論



第 345 回 CBI 学会研究講演会

「創薬フローにおけるデータベース活用」

開催趣旨：

インターネット上には多くのビッグデータが公開され、その活用としてオープン化が加速している。ライフサイエンス分野でも多くのデータベースが公開され、IT 技術とともにその情報量や質は日々進化している。創薬においても、多くの有用なデータベースが存在し、構造と活性の情報である ChEBML や PubChem、タンパク質構造の PDB などをはじめとするデータベースは必要不可欠になっている。そこで、今回の C B I 講演会ではケムインフォマティクス、バイオインフォマティクスの垣根を払ったデータの統合的な利用が創薬においてますます重要性を増しているという観点から「創薬フローにおけるデータベース活用」というテーマで、現在データベースを構築、管理、活用されている講師の方々により最新の状況をご紹介いただくことを企画致しました。データベース構築あるいはその利用の取り組み事例を通じて、今後の方向性や、解決すべき課題、さらに今必要なデータ効率的利用について、それぞれの立場からご講演頂き、議論いただきたい。

日時：2014 年 1 月 9 日（木）13:30 - 17:30

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：緑川 淳（ワールドフュージョン）、大元 和之（小野薬品工業）、谷村 隆次（東レ）

プログラム：

- (1) 13:30 - 13:40 開会挨拶
- (2) 13:40 - 14:30 「PDB Exchange Dictionary: 新フォーマットの読み解き方と使い道」
金城 玲（大阪大学 蛋白質研究所）
- (3) 14:30 - 15:20 「バイオ・ビッグデータに挑む：医・薬・食用生物の機能性 DB の構築とマイニング」
金谷 重彦（奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科）
- (4) 15:40 - 16:30 「創薬の初期研究におけるデータ統合：ターゲットと安全性の評価」
水口 賢司（独立行政法人 医薬基盤研究所）
- (5) 16:30 - 17:15 「創薬におけるオープンソースデータベースの効率的利用」
緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）
- (6) 17:15 - 17:30 総合討論



第 6 回 FMO 研究会

「FMO 法の創薬への適応例とその展望」 CBI 学会 2013 年大会フォーカストセッション

開催趣旨：

フラグメント分子軌道 (FMO) 法は 1999 年に北浦和夫教授等によって開発され、これにより巨大分子の非経験的分子軌道法による計算が可能になった。FMO 法のフラグメントに分割する方法はフラグメント間の相互作用、すなわち分子内・分子間の部分での相互作用解析を可能にしている。従って、FMO 計算の結果として得られるペア相互作用エネルギー (pair interaction energy; PIE) 解析は非常に有用である。また、分子間相互作用エネルギーを静電、分極、交換反発、電荷移動相互作用などの物理的に分かりやすい成分に分割することができる、エネルギー分割 (energy decomposition analysis; EDA) 解析は、相互作用の本質を探ることができる。CBI 学会は設立以来、計算化学を用いる論理的な創薬を主要なテーマの一つとしており、FMO 法を創薬に活かすことを目的に、昨年 FMO 研究会を発足しました。本フォーカストセッションでは、実際に FMO 法を創薬に適応した例の講演と併に FMO 法の創薬における今後の展望について討論する場としたい。

日時：2013 年 10 月 31 日 (木) 15:30 - 17:00

場所：東京・タワーホール船堀 研修室 (東京都江戸川区船堀 4 - 1 - 1)

<http://www.towerhall.jp/>

世話人：多田 幸雄 (東京大学創薬オープンイノベーションセンター)

プログラム：

- (1) 「セリンプロテアーゼ阻害剤における FMO による阻害メカニズムの考察」
上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)
- (2) 「プロリン誘導体のタンパク質との相互作用」
小沢 知永 (キッセイ薬品工業株式会社)
- (3) 「ABINIT-MP/BioStation による FMO 法の創薬への適用」
福澤 薫 (みずほ情報総研株式会社)
- (4) 「フラグメント分子軌道法による SAR 解析と分子設計への期待」
森 健一 (アステラス製薬株式会社)
- (5) 「リガンド - タンパク結合自由エネルギーの見積もりと FMO」
市原 収 (シュレーディングー株式会社)





今後の研究講演会 予定

第 346 回 CBI 学会研究講演会

「蛋白質のシミュレーションによる機能の解明」

日時：2014 年 2 月 13 日（木）13：15 - 17：55

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：石川 誠（日産化学工業）、砂田 真志（田辺三菱製薬）、高岡 雄司（アクセルリス）

第 347 回 CBI 学会研究講演会

「悪性脳腫瘍の ALA 光線力学診断・治療に向けて：

In silico 創薬分子デザインから臨床応用へ」

日時：2014 年 2 月 24 日（月）13：30 - 17：30

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：広野 修一（北里大学）、石川 智久（理化学研究所）

協賛：日本オミックス医療学会、日本薬物動態学会、ポルフィリン-ALA 学会

第 348 回 CBI 学会研究講演会

「Drug Discovery beyond Small Molecule：

中分子創薬への期待」

日時：2014 年 3 月 25 日（火）13：15 - 17：55

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：上村 みどり（帝人ファーマ株式会社）、服部 一成（塩野義製薬（株））、

狩野 敦（（株）菱化システム）

第 349 回 CBI 学会研究講演会


「オープンイノベーションの成果」

日時：2014 年 4 月 11 日（金）13：15 - 17：20

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル タワー C 8 階

カンファレンスルーム C01+C02（大阪市北区大深町 3 - 1）

世話人：坂田 恒昭（大阪大学）、鶴田 浩樹（神戸大学）



CBI 学会誌 第 2 卷 第 1 号

2014 年 1 月 31 日発刊

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 高橋 まき 町田 規子

湯川 真澄 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。

