

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



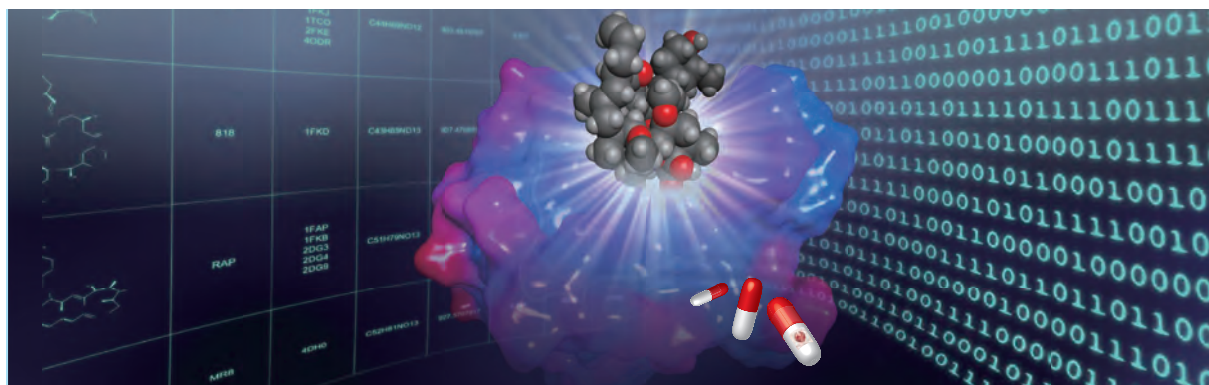
第 4 卷第 2 号

2016 年 5 月 31 日発行

目次

(1) CBI 学会 2016 年大会概要・プログラム・口頭発表 / ポスター投稿・参加登録のご案内 …	1
(2) CBI 学会 2016 年大会フォーカストセッション等の準備状況 ……………	2
(3) CBI ジャーナル便り (5) ……………	3
(4) 講演会報告 ……………	4
(5) 委員会報告 ……………	11

CBI2016 年大会



日時：2016 年 10 月 25 日 (火) – 27 日 (木)

会場：タワーホール船堀 (東京都江戸川区船堀 4-1-1)

テーマ：*in silico* 創薬の将来 生体分子シミュレーション、構造生物学、ビッグデータの連携からアカデミア創薬へ

大会長：後藤 俊男 (理化学研究所)

大会実行委員長：本間 光貴 (理化学研究所)

大会ホームページ：<http://cbi-society.org/taikai/taikai16/index.html>

プログラム・口頭発表 / ポスター投稿・参加登録

◆大会長講演

後藤 俊男 (理化学研究所)

◆プレナリー講演

アカデミア創薬

野田 哲生 ((公財) がん研究会)

満屋 裕明 (国立国際医療センター /
アメリカ国立癌研究所)

生体分子シミュレーション

北浦 和夫 (神戸大学)

Kenneth M. Merz, Jr (iCER, Michigan State Univ.)

構造生物とビッグデータ

石川 哲也 (理化学研究所)

岩田 想 (京都大学)

◆招待講演

アカデミア創薬

清宮 啓之 ((公財) がん研究会)

宮田 敏男 (東北大学)

門脇 孝 (東京大学)

生体分子シミュレーション

福澤 薫 (日本大学)

泰地 真弘人 (理化学研究所)

池口 満徳 (横浜市立大学)

構造生物とビッグデータ

白水 美香子 (理化学研究所)

岩崎 憲治 (大阪大学蛋白質研究所)

水口 賢司 (医薬基盤・健康・栄養研究所)

◆パネルディスカッション

アカデミア創薬から CBI への期待

榎林 陽一 (日本医療研究開発機構)

生体分子シミュレーションの実用化への道

奥野 恭史 (理化学研究所 / 京都大学)

◆新学術領域研究「分子ロボティクス」シンポジウム

◆IPAB 第 3 回 IT 創薬コンテスト:

「コンピュータで薬のタネを創る 3」表彰式

◆市民講座「疾患の治療と健康増進」

◆口頭発表・ポスター投稿

受付期間：2016 年 5 月 6 日 (金) ~ 8 月 29 日 (月)

投稿募集分野:

- ・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

◆参加登録

受付期間：2016 年 5 月 6 日 (金) ~ 10 月 14 日 (金)

参加費:

	早期割引 (9月30日まで)	10月1日以降
CBI 学会会員	12,000 円	17,000 円
一般 (非会員)	20,000 円	25,000 円
学生会員	2,000 円	5,000 円
学生 (非会員)	5,000 円	5,000 円

2016 年大会フォーカストセッション等の準備状況

2016 年大会 プログラム委員長
 広川貴次 (産業技術総合研究所)

CBI 学会 2016 年大会のプログラム委員長を務めさせていただくことになりました、産総研の広川でございます。よろしくお願ひ致します。

CBI 学会 2016 年大会のプログラム委員会も 2 回の開催を終え、理化学研究所の後藤先生 (大会長)、本間先生 (実行委員長) のもと、フォーカストセッション、ポスターセッションの企画が順調に進んでおります。

2016 年大会は、生体分子シミュレーション、構造生物学、ビッグデータ、アカデミア創薬を主題としたプレナリー講演や招待講演が行われますが、フォーカストセッション、ポスターセッションでは、昨年と同様、CBI 学会にある 5 つの分野を中心に幅広い企画を準備しております。フォーカストセッションでは、計算毒性学の基礎からインシリコ創薬まで幅広い内容のセッション、オミックス解析における実務者意見交換会、RNA アプタマー、先端的計測技術、個別化医療研究会、創薬オープンイノベーションにおける Big Data プラットフォーム等を主題にしたセッションを計画しております。研究者同士が現状の問題点や今後の方向性を議論できる場になるものと確信しております。どうぞご期待の上、皆様の積極的なご参加をお待ちしております。



また、本大会において、新学術領域研究「分子ロボティクス」シンポジウム、IPAB 第 3 回 IT 創薬コンテスト「コンピュータで薬のタネを創る 3」表彰式および発表会も共同開催されます。

本大会のポスターセッションでは、発表者に①「ポスター発表」のみ希望、②「口頭発表」のみ希望、③「ポスター発表」を希望、ただし「口頭発表」も可、④「口頭発表」または「ポスター発表」のどちらでも良い、といった広い選択肢を設けることにしました(詳しくは大会ホームページでご確認ください)。口頭発表は、各分野のフォーカストセッションとの共同開催も含まれます。是非、ポスター発表に加え、口頭発表の機会もご検討いただければ幸いです。口頭発表を通じて若手研究者をもっと露出させ、分野全体を盛り上げる機会にしたいと考えております。投稿は、8 月 29 日(月)まで受け付けております。

皆様のご参加をお待ちしております。

CBI ジャーナル便り (5)

CBI Chem-Bio Informatics Journal
Chem-Bio Informatics Society

◆ ポジションペーパーとして Communication (速報 : 4 頁以内) の投稿

CBI ジャーナルの特徴の一つとして、シミュレーションのみの論文を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、Communication (速報 4 頁以内) 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



◆ 速報 CBI ジャーナル新掲載論文

「HLA-A*31:01 とカルバマゼピン関連化合物の相互作用に関する *in silico* 解析」

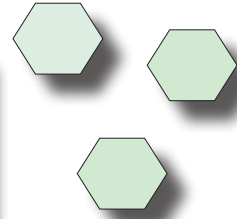
宮寺 浩子 (東京大学、国立国際医療研究センター)、大関 健志 (理化学研究所)、
菟田 泰誠 (理化学研究所)、平山 令明 (東海大学)

要旨 : カルバマゼピン (CBZ) は広く抗てんかん薬として使われているが、スティーブンス・ジョンソン症候群や中毒性表皮壊死症などの重篤な皮膚副作用 (cADR) を引き起こす主要な医薬分子としても知られている。東アジアやヨーロッパ人種においては、CBZ によって引き起こされる cADR の発症とヒト白血球抗原 HLA-A*31:01 が強く相関することが知られている。CBZ は体内に入り、種々の代謝産物を生成するが、どの化合物が cADR の発症に繋がるのかまだ分かっていない。そこで、本研究では、ドッキング・シミュレーションを用いて CBZ およびその主要な代謝産物の HLA-A*31:01 への結合性を解析し、cADR の発症に関わる化学種を推定した。

CBI ジャーナル編集委員会

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>

講演会記録



第 368 回 CBI 学会 講演会

「京」からポスト「京」へー革新的創薬基盤の構築に向けた取り組み」

日時：2016 年 1 月 13 日（火）13:00-16:50

場所：東京大学山上会館 2 階 大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：大元 和之（小野薬品工業）、石川 誠（日産化学工業）、谷村 直樹（みずほ情報総研株式会社）

プログラム：

- (1) 13:00-13:05 はじめに
- (2) 13:05-13:40 「ポスト「京」が拓く創薬計算の未来」
奥野 恭史（理化学研究所／京都大学大学院）
- (3) 13:40-14:15 「ポスト「京」における MD 高度化と次世代創薬技術の開発」
池口 満徳（横浜市立大学）
- (4) 14:15-14:50 「分子動力学法ソフトウェア、GENESIS の概要」
小林 千草（理化学研究所）
- (5) 15:00-15:35 「バクテリア細胞質中の生体分子ダイナミクスと相互作用」
大規模分子動力学計算による微視的理解
優 乙石（理化学研究所）
- (6) 15:35-16:10 「並列カスケード選択 MD による効率的立体構造サンプリングと長時間ダイナミクス」
北尾 彰朗（東京大学）
- (7) 16:10-16:45 「「京」・ポスト「京」を利用した革新的創薬基盤への期待」
嶋田 朋嘉（帝人ファーマ株式会社）
- (8) 16:45-16:50 「おわりに

開催報告：

「京」からポスト「京」へー革新的創薬基盤の構築に向けた取り組み」というテーマで講演会が開催された。創薬がますます困難になっていく中で、その解決策の一つとして期待されているのが、コンピュータを活用した IT 創薬である。そのような中、2020 年稼働を目指すポスト「京」には、より高速かつ高精度な IT 創薬を実現するための計算資源として一層の期待が集まっている。今回は、ポスト「京」の開発に携わっておられる先生方に研究の進捗状況と計画について講演いただくとともに、企業の先生からは、企業における「京」の成果とポスト「京」への期待について講演していただいた。講演会に続き、懇親会においても活発な議論がなされたが、奥野先生からは、「京」からポスト「京」の流れをまとめて説明し、議論できる貴重な機会になったとのお言葉をいただいた。

「ポスト「京」が拓く創薬計算の未来」奥野恭史先生（理化学研究所／京都大学大学院）
ポスト「京」創薬分野の代表として、「京」の成果を踏まえたポスト「京」創薬分野の全体像とサブ課題のご説明をいただいた。分子動力学法（MD）自体の高度化、MD を用いた動的解析から創薬へ向けた分子デザインへの応用に取り組むことを表明された。講演後は計算を用いた次世代の創薬の姿について議論が行われた。



奥野恭史先生



池口満徳先生



小林千草先生



嶋田朋嘉先生

「ポスト「京」における MD 高度化と次世代創薬技術の開発」池口満徳先生（横浜市立大学）

MD の高度化とアルゴリズムの深化、次世代創薬計算技術の開発について講演をいただいた。自由エネルギー計算法、マルコフ状態遷移モデルを開発例として開発内容を分かりやすくご説明いただいた。会場からは創薬への適用について関心が向けられた。

「分子動力学計算ソフトウェア、GENESIS の概要」小林千草先生（理化学研究所）

開発されている GENESIS について、計算コストがかかる「巨大な生体分子」、「自由エネルギー計算」という 2 つの側面から機能のご説明をいただいた。またソフトウェア公開に係る情報を提示いただいた。会場からは使いやすさへの関心の高さが覗かれた。

「バクテリア細胞質中の生体分子ダイナミクスと相互作用：大規模分子動力学計算による微視的理解」

優乙石先生（理化学研究所）

タンパク質の集積に関する計算に関して、先行研究の紹介から理研杉田研での計算例について講演をいただいた。これまでのタンパク単体での評価から細胞中でのタンパク挙動の解析へ繋がる計算として期待される。

「並列カスケード選択 MD による効率的立体構造サンプリングと長時間ダイナミクス」北尾彰朗先生（東京大学）

タンパク質とリガンドとのドッキングにおいて、結合自由エネルギーの計算に有効な手法について講演いただいた。特に、PaCS-MD を行い MSM で解析することで、タンパク質の動きを取り入れたより精度の高い結合自由エネルギー計算が可能であり、今後の展開が期待される。

「「京」・ポスト「京」を利用した革新的創薬基盤への期待」嶋田朋嘉先生（帝人ファーマ株式会社）

KBDD への参画を中心に企業からの視点で京コンピュータ、いわゆるスパコン利用への期待について講演いただいた。現在活動中の KBDD のシミュレーション創薬ワーキンググループでは MP-CAFÉ の実用化を目指しており、今後の創薬設計場面に於いて、スパコンなどインシリコ創薬の活躍が期待される。



第 369 回 CBI 学会 講演会

「ゲノム医療 - 個別化医療に向けた研究の最前線 -」

日時：2016 年 2 月 5 日（金）13:10-16:45

場所：東京大学山上会館 2 階 大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：松本 俊二（富士通）、谷村 隆次（東レ）、大軽 貴典（田辺三菱製薬）

プログラム：

- (1) 13:10-13:15 開催の挨拶
- (2) 13:15-14:05 「ゲノムバイオマーカーに基づくがん新薬開発と実地臨床への応用」
土原 一哉（国立がん研究センター）
- (3) 14:05-14:55 「シーケンス結果を医療に役立てて頂くために」
熊井 広哉（イルミナ株式会社）
- (4) 15:10-16:00 「ゲノム医療に向けた多因子疾患解析の情報統計的アプローチ」
瀬々 潤（産業技術総合研究所）
- (5) 16:00-16:45 「体液中のマイクロ RNA によるがん検査の可能性」
滝澤 聡子（東レ株式会社）

開催報告：

2016 年 2 月 5 日、東京大学山上会館にて開催した、第 369 回 CBI 学会研究講演会について報告する。ゲノムシーケンシングの劇的な価格ダウンを契機にゲノム情報に基づく医療（Precision Medicine, あるいは Personalized Medicine）が臨床レベルで実現可能となってきた。幅広い学問分野にかかわり、技術面だけでなく、個人の根源的な情報へのアクセスという観点から、倫理・法制面でも解決すべき課題が山積する奥深い領域である。今回、ゲノム医療に関わる第一回の研究講演会として、最前線で活躍されている 4 名の講師の方々にご講演をいただいた。



土原一哉先生（国立がん研究センター）には、ゲノム情報にもとづいて個々の患者と治療法（分子標的薬の選択など）の適合性を事前に知ることで効果的な治療が実現できることをわかりやすく解説していただき、同センターを中心に、製薬企業 14 社をメンバーとして進められている SCRUM-JAPAN の活動をご紹介いただいた。今後の方向性として「より実用レベルを上げるために、マルチオミックスを含めた情報処理が重要になる」との期待が示された。



熊井広哉先生（イルミナ株式会社）には、シーケンシングの劇的なコストダウンを実現し、事実上世界を席巻している同社のシーケンサーがどのように活用されているかを Genomics England など具体的な事例としてご紹介いただいた。今後は、簡易な血液採取に基づくがん検出技術も提供することで、がん治療に貢献していくとの方向性が示された（GRAIL 社設立）。

瀬々潤先生（産業技術総合研究所）には、シーケンサーが生み出す膨大なデータから、単一遺伝子ではなく複数の遺伝子セットと疾患の関連性を解析する高速計算手法（LAMP 法）

をご紹介いただいた。ゲノムデータは、データ数が多くデータ項目の少ない従来のいわゆる Big Small Data とは質的に異なり、データ数が少なくデータ項目が多い Small Big Data であるため、データ項目の組み合わせ爆発問題がネックとなっている。LAMP 法はこのような Small Big Data から有意な遺伝子セットを高速に抽出する画期的な算法である。

滝澤聡子先生（東レ株式会社）には、JBIC が事務局となって進めている国プロで同社が開発した、血液中の 2500 種にもおよぶ miRNA を同時に検出する技術（3D-Gene®）を紹介していただき、組織の生体検査を血液で代用させる Liquid Biopsy 技術の具体例が示された。

参加者申し込みは会場定員に達して早々に締め切れ、当分野の関心の高さが感じられた。講演後の懇親会においても、「今日の講演会は、構成もよく、講師の話もわかりやすく有意義だった」とのコメントを数名の方にいただいた。



土原一哉先生



熊井広哉先生



瀬々潤先生



滝澤聡子先生

第 370 回 CBI 学会 講演会

「分子イメージングと創薬」

日時：2016 年 3 月 3 日（木）13:20-17:30

場所：東京大学山上会館 2 階 大会議室（東京都文京区本郷 7-3-1）

世話人：上村 みどり、松本 由之（帝人ファーマ）、相良 武（大鵬薬品工業）、緑川 淳（ワールドフュージョン）

プログラム：

- (1) 13:20-13:30 はじめに
- (2) 13:30-14:10 「新規エピトープタグ開発と分子イメージングへの応用」
高木 淳一（大阪大学蛋白質研究所）
- (3) 14:10-14:50 「電顕による Integrative Modeling」
岩崎 憲治（大阪大学蛋白質研究所）
- (4) 15:10-15:50 「生体膜マイクロチップを利用した膜輸送体の超高感度活性イメージング」
渡邊 力也（東京大学工学系研究科）
- (5) 15:50-16:30 「細胞内情報処理反応の 1 分子可視化解析」
佐甲 靖志（理化学研究所佐甲細胞情報研究室）
- (6) 16:30-17:10 「生体イメージングが切り拓く、免疫炎症疾患への新たな創薬研究」
石井 優（大阪大学生命機能研究科）
- (7) 17:10-17:30 おわりに

開催報告：

近年、生体内での分子プロセスの可視化に関する基礎的・臨床的研究、およびその可視化手法の応用研究である「分子イメージング」に関心が集まっています。米国では National Institutes of Health (NIH) を中心に、多くの大学・研究機関のみならず、分子生物学や画像医学の関連企業も、分子イメージング研究に競って参入しています。ヨーロッパでは European Commission が、本研究分野を重要課題のひとつに選定し、本格的な研究体制が構築されつつあります。アジアでは中国を中心に、近年大きな成果が得られつつあります。そこで今回、「分子イメージングと創薬」というテーマで、分子イメージングの総論、クライオ電子顕微鏡、ライブイメージングおよび生命現象の可視化など、分子イメージング研究の入門から最新技術とその応用事例まで、第一線の先生方にご講演いただくことを企画いたしました。

当日は60を超える大学、研究機関、製薬企業から多くの参加者が集まり、創薬関係者の関心を裏付ける盛況な会となりました。講演会では、最初に高木先生より従来のエピトープタグの欠点を克服した新規アフィニータグシステム「PA タグシステム」及び目的タンパク質の望みの場所に高親和性エピトープを配置する「PA タグ挿入法」の開発に関してご報告いただきました。本法は光学顕微鏡や電子顕微鏡イメージングにおいて全く新しい部位特異的標識法となることが期待されています。次に岩崎先生よりクライオ電子顕微鏡の近年の急速な発展と大阪大学蛋白質研究所における基盤構築の現状をご紹介いただきました。さらに「2D ハイブリッド解析法」すなわち



3次元構造を求めるのが困難なコンフォメーションに対して、電顕のスナップショット画像、あるいは、2次元の平均画像と、X線結晶構造解析で求められた原子座標を組み合わせることでその構造を推定していく独自の的方法論とその応用についてご報告いただきました。次に、渡邊先生より、トランスポーターなどの膜輸送体を標的とした創薬で重要となる輸送活性の計測のために新たに開発された生体膜マイクロチップ及び、蛍光イメージングに基づいた膜輸送体のための超高感度活性計測システムについてご報告いただきました。

一方、佐甲先生からは細胞内情報伝達を1細胞/1分子レベルで解析するアプローチで明らかになった RAS-MPAK システムの構成要素蛋白質である SOS と RAF の構造・反応ダイナミクスの計測及び、解明された細胞内情報伝達反応の制御機構をご紹介いただきました。最後に石井先生より2光子励起顕微鏡を用いて、生きた個体の生きた骨組織内部を非侵襲的に観察することにより破骨細胞の遊走・分化・機能の制御機構を明らかにする手法についてご報告いただきました。また、破骨細胞と骨芽細胞の同時可視化系により各種の骨疾患治療薬やバイオ製剤の作用を *in vivo* で1細胞レベルで解析する系についてご紹介いただきました。さらに動的生体イメージングの今後の創薬研究におけるさらなる応用と将来性についてご提案いただき、盛況のうちに講演会が終了しました。



高木淳一先生



岩崎憲治先生



渡邊力也先生



佐甲靖志先生



石井優先生

第 371 回 CBI 学会 講演会

「翻訳後修飾研究のフロンティアとそれを支える基盤技術 – 創薬 R&D への期待 –」

日時：2016 年 4 月 22 日（金）13:00-17:55

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（大阪市北区大深町 3-1）

共催：（公財）都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西

世話人：木下 誉富（大阪府立大学）、森 一郎（神戸大学）、鶴田 宏樹（神戸大学）

プログラム：

- (1) 13:00-13:10 開催の挨拶
- (2) 13:10-14:10 「糖鎖の生命分子構造学」
加藤 晃一（自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター、
名古屋市立大学大学院薬学研究科）
- (3) 14:10-15:10 「ユビキチン化、SUMO 化によるタンパク質の立体構造変換を介した機能制御」
森本 大智（京都大学大学院工学研究科）
- (4) 15:30-16:30 「リン酸化プロテオミクスを駆使した創薬キノームプロファイリング」
石濱 泰（京都大学大学院薬学研究科）
- (5) 16:30-17:00 「SPRING-8・SACLA の構造生物学研究の現状と将来」
山本 雅貴（理化学研究所放射光科学総合研究センター）
- (6) 17:00-17:30 「一歩先のインシリコ・スクリーニングと分子設計」
福西 快文（産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター）
- (7) 17:30-17:55 まとめと総合討論

開催報告：

CBI 学会関西地区では、アカデミア創薬に焦点を合わせ、関西の特色である医療イノベーション戦略や創薬支援ネットワーク、産官学の連携、国際化戦略、医療・構造生物学と計算科学の融合、臨床情報の創薬応用、メタゲノム・マーカー探索などに焦点を当てて講演会の企画を行ってきた。今回は、「翻訳後修飾研究のフロンティアと構造生物学」を主たるテーマとし、創薬研究への期待という視点で翻訳後修飾の最前線と創薬研究を支える基盤技術の最新状況を主題として講演会を企画した。

現在の創薬 R&D においては、標的蛋白質について立体構造を含む諸性質をできるだけ理解し、論理的に研究を進めることがグローバル・スタンダードとなっている。しかしながら、リン酸化、糖鎖付加、アセチル化、ユビキチン化（SUMO 化）など多岐にわたる蛋白質の翻訳後修飾については、未だに分かっていない点が多い。こういう状況であるために、生命活動のオン・オフを司っているにも拘らず、翻訳後修飾の知見は創薬研究においては積極的に取り入れられていない。

加藤晃一先生には糖鎖の生理機能と創薬への応用について、森本大智先生（白川昌宏先生 代理）には病態で発見されるポリユビキチン化の形成メカニズムについて、石濱泰先生にはリン酸化プロテオミクスの最新データとその創薬への応用について、それぞれ解り易く御講演いただいた。とくに特定の蛋白質間相互作用に糖鎖-糖鎖の相互作用が必須である知見には驚かされた。近い将来、これらの翻訳後修飾研究が創薬 R&D に新しい潮流を生むと期待される。さらに、SPRING-8 における構造生物学プラットフォームの最新情報と将来構想を山本雅貴先生に、インシリコ・スクリーニングと分子設計に関する最新動向を福西快文先生に解説いただいた。本会の最後には講演者、参加者の全員で、翻訳後修飾研究がもたらす創薬 R&D への新展開に関して克服すべき課題や取り組むべきアクションについて意見交換した。





加藤晃一先生



森本大智先生



石濱泰先生



山本雅貴先生



福西快文先生



今後の講演会 予定

第 373 回 CBI 学会講演会

「トランスポーターの関わるヒト薬物動態を *in vitro* 実験を基に予測する ;
実験条件の違いにより生じえる予測結果の相違」

日時 : 2016 年 6 月 2 日 (木) 10:30-17:50

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)、前田 和哉 (東京大学大学院薬学系研究科)

第 374 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 : 2016 年 7 月 22 日 (金) 13:10-17:45

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 : 新美 達也 (アステラス製薬)、矢城 美代子 (大正製薬)、狩野 敦 (菱化システム)

第 375 回 CBI 学会講演会

「治療する医療から先制医療・予防医療へ」

日時 : 2016 年 8 月 2 日 (火) 13:15-17:30

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 : 中嶋 久士 (興和)、田上 宇乃 (味の素)、佐藤 秀行 (オープンアイ・ジャパン)

委員会報告

【特定非営利活動法人 情報計算化学生物学会 総会】

第 8 回特定非営利活動法人情報計算化学生物学会総会

日時：2016 年 3 月 24 日（木） 18:30-19:20

場所：東京工業大学 田町 CIC 2 階多目的室 4（東京都港区芝浦 3-3-6）

出席者数等 出席者 6 名、正会員総数 12 名

審議事項：第 1 号議案 2015 年度活動報告

第 2 号議案 2015 年度決算報告・監査報告

第 3 号議案 2016 年度活動計画

第 4 号議案 2016 年度予算

第 5 号議案 2016 年度役員名簿の報告

【特定非営利活動法人 情報計算化学生物学会 理事会】

第 9 回特定非営利活動法人情報計算化学生物学会理事会

日時：2016 年 3 月 24 日（木） 19:20-19:30

場所：東京工業大学 田町 CIC 2 階多目的室 4（東京都港区芝浦 3-3-6）

出席者：理事総数 7 名 うち出席者数 6 名

審議事項：理事の変更に関する件

第 10 回特定非営利活動法人情報計算化学生物学会理事会

日時：理事会の決議があったものとみなされた日 2016 年 4 月 11 日（月）

理事の総数及び表決数：理事総数 7 名（電磁的方法表決 7 名）

理事会の決議があったものとみなされた事項の内容：理事長選任に関する件

【評議員会】

日時：2016 年 4 月 1 日（金） 13:10-14:50

場所：東京工業大学 田町 CIC 2 階多目的室 1（東京都港区芝浦 3-3-6）

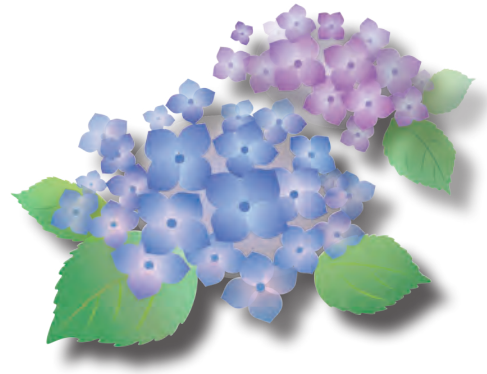
出席者（敬称略）：田中 博（東北メディカルメガバンク機構／東京医科歯科大学）、新井 好史（上原記念生命科学財団）、石田 誠一（国立医薬品食品衛生研究所）、片倉 晋一（第一三共 RD ノバーレ）、小長谷 明彦（東京工業大学）、高岡 雄司（ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社）、多田 幸雄（東京工業大学）、中井 謙太（東京大学医科学研究所）、福澤 薫（日本大学）、茂柳 薫（順天堂大学）、湯田 浩太郎（インシリコデータ）、小澤 陽子（事務局）

欠席者（敬称略）：石川 岳志（長崎大学）、石川 智久（NPO 法人地方再興・個別化医療支援）、一石 英一郎（国際医療福祉大学病院）、岡部 隆義（東京大学創薬機構）、岡本 正宏（九州大学）、荻島 創一（東北大学東北メディカル・メガバンク機構）、粕谷 敦（第一三共）、河合 隆利（イーザイ）、坂田 恒昭（塩野義製薬／大阪大学）、杉山 雄一（理化学研

究所)、田中 成典(神戸大学)、中馬 寛(徳島大学)、藤 博幸(関西学院大学)、富田 勝(慶應義塾大学先端生命学研究所)、
広野 修一(北里大学)、船津 公人(東京大学)、本間 光貴(理化学研究所)、水口 賢司(医薬基盤・健康・栄養研究所)、
水間 俊(松山大学)、宮本 秀一(崇城大学)

- 議題: (1) 2015 年度CBI学会活動報告・決算報告・監査報告
(2) 2016 年度CBI学会活動計画 について
(3) 会長選挙について
(4) 評議員の任期について

- 資料: (1) 2015 年度活動報告
(2) 2015 年大会完了報告
(3) 2015 年度活動計算書、計算書類の注記
(4) 2015 年度貸借対照表
(5) 2015 年度財産目録
(6) 2015 年度監査報告書
(7) 2016 年度活動計画
(8) 2016 年大会概要
(9) CBI 学会会長選挙規定(案)
(10) 公示(案)
(11) 評議員の任期について



【執行部会】

第 28 回執行部会

日時: 2016 年 2 月 26 日(金) 18:35-20:15

場所: CBI 学会 新宿オフィス(東京都新宿区西新宿 7-2-6 西新宿 K-1 ビル 3 階会議室)

出席者(敬称略): 石川 智久(NPO 法人地方再興・個別化医療支援、webEX)、岡部 隆義(東京大学創薬機構)、河合 隆利(エーザイ)、小長谷 明彦(東京工業大学)、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)、福澤 薫(日本大学)、本間 光貴(理化学研究所)、水間 俊(松山大学、webEX)、小澤 陽子(事務局)

欠席者(敬称略): 片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、多田 幸雄(東京工業大学)、田中 成典(神戸大学)、高岡 雄司(ダッソー・システムズ・バイオピア)

- 議題: (1) 総会議案策定
(2) 研究会細則改訂について(河合先生)
(3) 執行部会メンバーの推薦
(4) WEB 会議システムの継続利用について(小長谷先生)
(5) 2016 年大会進捗(本間先生)
(6) 編集委員会進捗
(7) 関西部会進捗
(8) 研究講演会における講師経費の増額について
(9) 講演会および大会講師の旅費支払規定について

- 資料: (1) 総会資料ドラフト
(2) 研究会細則改訂案
(3) 2016 年大会プログラム 0303 版
(4) 講演会および大会講師の旅費支払規定について

- (5) 本間実行委員長より 現時点のプログラム
- (6) ポスターの図案イメージ図
- (7) 協賛金募集の案内

第 29 回執行部会

日時：2016 年 3 月 24 日 (木) 19:30-20:45

場所：東京工業大学 田町 CIC 2階多目的室4 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者 (敬称略)：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)、本間 光貴 (理化学研究所)、水間 俊 (松山大学、webEX)、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)、多田 幸雄 (東京工業大学)、田中 成典 (神戸大学)、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)、高岡 雄司 (ダッソー・システムズ・バイオビオ)、福澤 薫 (日本大学)

議題：(1) 研究会細則 (3 月 8 日改訂) の最終承認

- (2) 研究推進委員会委員の推薦について
- (3) 講師旅費規定について
- (4) 創薬研究会の副主査の推薦について
- (5) 神戸大学計算科学教育センター主催「計算生命科学の基礎」遠隔配信講義の共催について
- (6) 会員管理システム SMOOSY に関して
- (7) 会長選挙の規約と公示文書 (評議員会用) の確認

資料：(1) 研究会細則 (3 月 8 日改訂版)

- (2) 講師旅費規程案
- (3) 抜粋 講義別 _ 良かった講義 (神戸大学計算科学教育センター主催「計算生命科学の基礎」)
- (4) 報告 _ アンケート _ シラバス _ チラシ _ 201603 (神戸大学計算科学教育センター主催「計算生命科学の基礎」)
- (5) 会員管理システム SMOOSY に関する提案 (株式会社アトラス)、関連文書 7 件
- (7) 評議員会用会長選挙の規約と公示文書 (案)

【関西部会】

第 8 回関西部会運営委員会

日時：2016 年 2 月 21 日 (日) 13:00-14:00

場所：(財) 都市活力研究所 セミナールーム (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)：小長谷 明彦 (東工大)、森 浩禎 (奈良先端大)、坂田 恒昭 (関西副部会長、大阪大、塩野義製薬)、田口 隆久 (産業技術総合研究所)、木下 誉富 (大阪府立大)、六嶋 正知 (塩野義製薬)、森 一郎 (神戸大)、志水 隆一 (都市活力研究所)、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)：正城 敏博 (大阪大)、鶴田 宏樹 (神戸大)、奥野 恭史 (京都大)、早乙女 周子 (京都大)、水口 賢司 (医薬基盤)、山崎 一人 (大日本住友製薬)

議題：(1) 次回の CBI 学会関西部会講演会について

- (2) 次々回 (2016 年 11 月 25 日 (金) 13:00 ~) の CBI 学会関西部会講演会について
- (3) 今後の企画・運営、その他

第 9 回関西西部会運営委員会

日時：2016 年 4 月 22 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 VisLab OSAKA (大阪市北区大深町 3-1 グランフロント大阪タワー C 9F)

出席者(敬称略)：小長谷 明彦(東工大)、坂田 恒昭(関西副部会長、大阪大 / 塩野義製薬)、木下 誉富(大阪府立大)、田口 隆久(情報通信研究機構・脳情報通信融合研究センター)、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)、森 一郎(神戸大)、鶴田 宏樹(神戸大)、志水 隆一(都市活力研究所)、中嶋 久士(興和)、田中 成典(関西西部会長、神戸大)、牛尾(書記、神戸大)

欠席者(敬称略)：正城 敏博(大阪大)、森 浩禎(奈良先端大)、奥野 恭史(京大)

議題：(1) 次回(2016 年 11 月 25 日(金) 13:00 ~) の CBI 学会関西西部会講演会について

(2) AI 創薬セミナーの開催について

(3) 今後の企画・運営、その他

【創薬研究会運営委員会】

第 22 回創薬研究会運営委員会

日時：2016 年 3 月 3 日 (木) 10:00-12:20

場所：東京大学山上会館 会議室 001 (東京都文京区本郷 7-3-1)

出席者(敬称略)：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(菱化システム)、相良 武(大鵬薬品工業)、佐藤 秀行(オープンアイ・ジャパン)、高岡 雄司(DS バイオピア)、高土居 雅法(杏林製薬)、田淵(味の素)、多田 幸雄(東京工業大学)、中嶋 久士(興和)、松本 俊二(富士通)、松本 由之(帝人ファーマ)、矢城 美代子(大正製薬)、塚田 優子(CBI 学会事務局)

欠席者(敬称略)：石川 誠(日産化学工業)、大元 和之(小野薬品工業)、小長谷 明彦(東京工業大学)、嶋根 みゆき(中外製薬)、田中 博(ToMMo)、谷村 直樹(みずほ情報総研)、谷村 隆次(東レ)、新美 達也(アステラス製薬)、緑川 淳(ワールドフュージョン)、本間 光貴(理化学研究所)、水間 俊(松山大学)

議題：(1) 講演会企画進捗状況の報告(資料 1)

(2) 講師交通費について

(3) 担当者変更

(4) グループ討議

資料：(1) 講演会企画進捗状況



【2016 年大会拡大実行委員会】

第 3 回 2016 年大会拡大実行委員会

日時：2016 年 3 月 8 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 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)：後藤 俊男(理化学研究所)、本間 光貴(理化学研究所)、相良 武(大鵬薬品工業)、奥野 恭史(京都大学大学院)、広川 貴次(産業技術総合研究所)、石川 智久(NPO 地方再興・個別化医療支援、WebEX)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、小長谷 明彦(東京工業大学)、多田 幸雄(東京工業大学)、福澤 薫(日本大学)、水間 俊(松山大学)、小宮山 直美(事務局)、小澤 陽子(事務局)

欠席者(敬称略)：竹中 登一((独) 医薬基盤研究所 / (公財) ヒューマンサイエンス振興財団)、田中 成典(神戸大学)、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)、岡部 隆義(東京大学)、河合 隆利(エーザイ)、高岡 雄司(ダッソー・システムズ・バイオピア)、横山 茂之(理化学研究所)

- 議題: (1) 基調講演・招待講演の決定
(2) 出展・スポンサーの状況確認
(3) 協賛金募集について
(4) 市民講座講師について
- 資料: (1) 現状のプログラム
(2) 出展募集進捗状況
(3) 協賛金募集文書
(4) 広報ポスター案
(5) プログラム委員会議事録
(6) 大会期間中の会合日程
(7) 市民講座の講演候補者
(8) パネルディスカッション論点案
(9) 大会長・実行委員長コンタクト状況

【2016 年大会 プログラム委員会】

第 2 回 2016 年大会プログラム委員会

日時: 2016 年 4 月 1 日 (金) 10:00-12:00

場所: 東京工業大学 田町 CIC 2 階多目的室 1 (東京都港区芝浦 3-3-6)

出席(敬称略、分野順): 広川 貴次(産業技術総合研究所)、本間 光貴(理化学研究所)、多田 幸雄(東京工業大学)、石川 岳志(長崎大学、webEX)、福澤 薫(日本大学)、高岡 雄司(ダッソー・システムズ・バイオビア)、片倉 晋一(第一三共 RD ノバーレ)、沖山 佳生(理化学研究所)、中嶋 久士(興和(株))、中村 光浩(岐阜薬科大学)、荻島 創一(東北大学 東北メディカル・メガバンク機構、webEX)、茂榎 薫(順天堂大学)、長谷 武志(NPO システム・ バイオロジー研究機構)、石田 誠一(国立医薬品食品衛生研究所)、湯田 浩太郎(ンシリコデータ)、植沢 芳広(明治薬科大学)、石川 智久(NPO 地方再興・個別化医療支援、webEX)、小長谷 明彦(東京工業大学)、多田 隈 尚史(京都大学)、関嶋 政和(東京工業大学)、萩谷 昌己(東京大学)、小澤 陽子(事務局)、小宮山 直美(事務局)

欠席(敬称略、分野順): 水間 俊(松山大学)、山岸 賢司(日本大学)

- 議題: (1) フォーカストセッション企画説明
(2) フォーカストセッションの日程・時間枠の配分について
(3) 口頭発表のみの発表追加について
(4) ポスター投稿のプロモーションについて

- 資料: (1) 大会プログラム枠
(2) 各分野のフォーカストセッション企画案一覧



CBI 学会誌 第 4 卷 第 2 号

2016 年 5 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 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。

