

CBI学会誌



第9卷第3号

2021年9月1日発行

多様なサイエンスの融合と倫理

小長谷 明彦

恵泉女学園大学 客員教授
東京工業大学 名誉教授
特定非営利活動法人 情報計算化学生物学会 理事長

2011年に創始者である神沼二真先生からCBI学会を引き継いでから、はや10年の歳月が過ぎた。2012年に特定非営利活動法人の認証を受け、毎月の研究講演会を企画するために法人会員を中心に創薬研究会や関西支部会という組織を立ち上げた。また、学会の年次大会や出版事業を活性化するために研究会を組織し、これまでに、FMO研究会、計算毒性学研究会、個別化医療研究会、オミックスの原理研究会が発足した。2018年には若手独自の活動を支援する若手の会が、2020年にはシニア研究者を中心とした先端領域 ELSI 研究所、生体機能モジュレータ研究所、量子構造生命科学研究所、次世代モダリティ研究所が小規模ながら発足した。

CBI学会はその名が示すとおり化学、生物、情報の境界領域研究を推進するための学会である。特に、インシリコ創薬は、化学、生物、情報に関わる様々な知識や技術が必要となるため、CBI学会のメインテーマの一つとなっている。では、CBI学会はインシリコ創薬のための学会なのだろうか？確かに、メインとなる学会活動の多くはインシリコ創薬に関連している。しかしながら、CBI学会の活動領域を「インシリコ創薬」に限定したくはないと考えている。近年、創薬の対象は小分子から抗体医薬、さらにはバイオ製剤やモバイル医療アプリと大きく広がりつつある。創薬モダリティの変化とともに、AIやITの活用が必須となり、創薬とヘルスケアの境界もあいまいになりつつある。既存の「インシリコ創薬」にしがみついている、あつという間に取り残されるほど技術革新の波は早い。

「不易流行」という四字熟語があるが、これをCBI学会の基本理念としたい。「流行」に関しては、CBI学会はIT化やAI化という様々な技術革新の波をいち早く取り入れる柔軟性を備えている。昨年度は、コロナ禍により研究会や年次大会のオンライン化を余儀なくされたが、大会委員ならびに事務局の献身的な努力により無事開催することができた。では、「不易」は何だろうか。これを「多様性」に求めたい。CBI学会の学会員は異なる専門領域を背景とする。専門分野が異なる研究者が交流することでサイエンスが融合し、技術革新が産まれることが期待できる。このようなサイエンスの融合の場を提供することがCBI学会の役割であり、そして強みであると考えている。

最後にこのようなサイエンスの融合を目指すにあたり「倫理」の重要性について触れておきたい。先端的革新技術を推進するためにはELSI（倫理的法的社会的課題）やRRI（責任ある研究と技術革新）やTA（技術の社会影響評価）が必要であり、CBIを場とした社会および市民との対話を進めたいと考えている。

目次

(1) 巻頭言 「多様なサイエンスの融合と倫理」	
小長谷 明彦（恵泉女学園大学客員教授、東京工業大学名誉教授、 特定非営利活動法人 情報計算 化学生物学会 理事長）……………	1
(2) ホットトピックス「生物活性予測値を記述子として用いた in vivo の毒性予測」	
本間 光貴（理化学研究所 生命機能科学研究センター）……………	3
(3) 講演会報告・予告……………	5
(4) 委員会報告……………	11
(5) 編集後記……………	14

Hot!!! TOPICS

～最新文献の紹介

「AI 技術とその応用」分野

生物活性予測値を記述子として用いた in vivo の毒性予測

本間 光貴

理化学研究所 生命機能科学研究センター

DE LOMANA, Marina Garcia.; *et al.* ChemBioSim: Enhancing Conformal Prediction of In Vivo Toxicity by Use of Predicted Bioactivities. *Journal of chemical information and modeling*, **2021**, 61(7), 3255–3272.

医薬品の研究・開発の過程は、hit 探索、hit to lead、lead 最適化、前臨床試験、第一相臨床試験 (Phase I) , Phase II, Phase III で構成される。ファイザー社の 2000 年代の統計では、これらの過程のうち、成功率が最も低い (25% 以下) のは hit to lead と Phase II となっている。hit to lead は、疾患ターゲットに対するタンパク質レベルの活性を持っているだけの出発点となる化合物から、動物モデルにおいて薬効が確認できるレベルの化合物まで導く必要があり、化合物に対して多くの評価項目の改善が同時に要求される段階である。また、Phase II では、薬効の強さと安全性 (毒性) のバランスが判断材料となり、予期せぬ毒性でドロップすることもある。以上から、動物モデルにおける体内動態や毒性を予測することは非常に重要であり、AI による予測への期待も高まっている。

精度や適用範囲 (applicability domain, AD) の高い AI 予測モデルを構築するためには、(1) 質 (多様性) と量を兼ね備えたデータセット、(2) 学習効率の高い学習方法 の両方が重要である。しかし、動物モデルの体内動態や毒性においては、公開されているデータが少ない。また、学習方法についても、特に記述子においてタンパク質への親和性などと異なり、体内動態・毒性に特化した記述子が少ないのが現状であり、これらの理由から、in vivo 毒性に対する AI 活用はあまり進んでいない。

今回紹介する論文では、ドイツの総合化学企業 BASF SE の Marina Garcia de Lomana を中心として、オーストリア・ビエナ大学、ドイツ・シャリテールベルリン医科大学からなるグループが生物活性の予測値を記述子として用いて、in vivo 試験における毒性である MNT (in vivo micronucleus test, 遺伝毒性を評価する小核試験)、DILI (drug-induced liver injury, 薬物性肝障害)、DICC (cardiological complications, 心臓障害) の 3 種類の予測を試みた。AI 予測モデルを構築するための学習方法としては、ランダムフォレストを使うが、学習セットから 70% のデータを抽出してモデルを作成する過程を 20 回繰り返して予測結果の p 値を計算できるようにしている。(図 1 参照。筆者らは conformal prediction model (CP model) と呼んでいる)

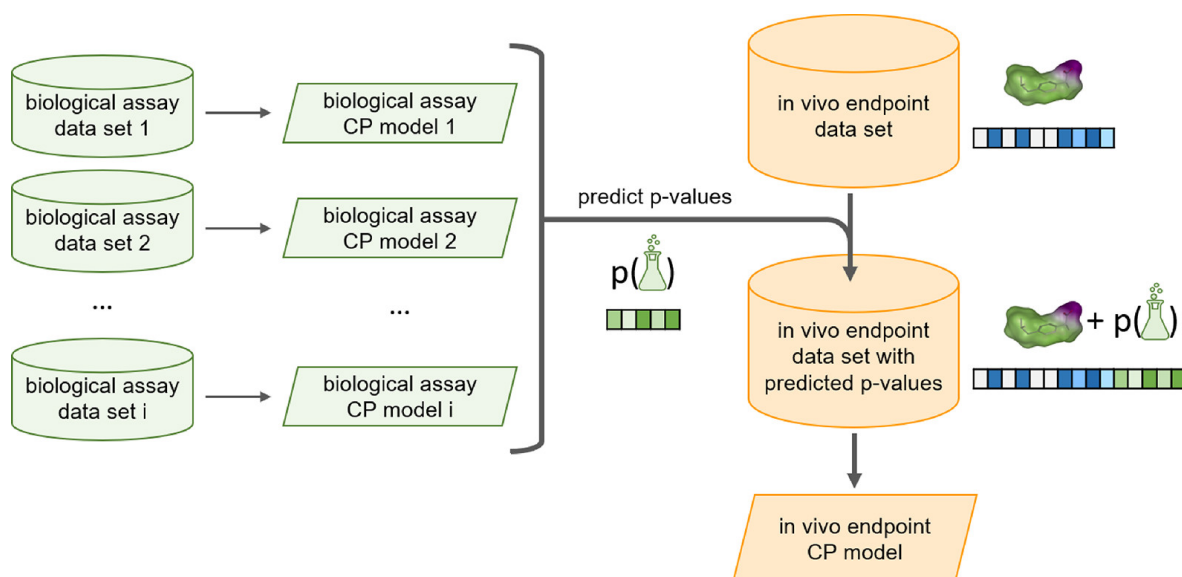


図 1. 予測の信頼性として p 値を付与する CP model

原著より転載 : Attribution 4.0 International (CC BY 4.0)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.1c00451>

もう一つの特徴は、記述子として通常使用される構造フィンガープリントなどの分子記述子 (CHEM, chemical descriptor)に加えて、in vitro/in vivoの生物試験結果を予測する CP model を別途作成しておき、各化合物のそれらの予測結果を記述子 (BIO, bioactivity descriptor) として用いている点である。CHEM 記述子としては、2048 bit からなる Morgan fingerprint (ECFP4 に近い)、RDkit によって計算される 119 種類の分子記述子を計算する。BIO 記述子としては、毒性関連ターゲットや in vitro 毒性試験結果等で構成される 373 種類の生物活性項目のデータ (各項目、最低 200 個以上の active、200 個以上の inactive を持つ) によって CHEM 記述子を用いて CP model を作成し、それらの予測値を記述子として利用する。CHEM 記述子、BIO 記述子のそれぞれで MNT、DILI、DICC の予測 AI を構築し、性能を比較したところ、F1 score, マッシュ係数 (MCC) などの複数の性能指標において、いずれの予測においても BIO 記述子が有意に CHEM 記述子よりも高い予測性能となった。MCC で最も差がついたのは、MNT で、CHEM: 0.28 に対して BIO: 0.46 であり、MCC で 0.28 は、かなり予測精度が低いので、BIO によって実用性の高いモデルを作成できたことになる。

以上述べたように、in vivo 毒性を予測するためには、従来型の CHEM 記述子だけでは、予測対象との関連性が低く学習効果が低いことがあるが、一旦、373 種類の生物活性の予測モデルを作成して、その予測値を in vivo 毒性の予測の際の記述子として使うことによって精度向上が見込めることがわかった。また、CP model によって予測結果の信頼性を p 値で表すことができるので、自分の化合物が予測 AI の AD に含まれるかどうか容易に判定できる。今回の手法は、3 種類の in vivo 毒性指標のみへの適用であるが、3 種類全部において堅牢に精度向上が見られたので、他の毒性手法、さらに体内動態指標にも適用できる可能性があり、今後の展開が期待される。

講演会 報告・予告

第 422 回 CBI 学会 講演会

「With/After 新型コロナウイルス」

日時：2021 年 5 月 14 日（金）13:00 – 17:00

場所：オンライン配信（Zoom Meeting 利用）

世話人：坂田 恒昭（大阪大学）、田口 隆久（情報通信研究機構）、六嶋 正知（塩野義製薬）

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

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:50 「新型コロナウイルスの正体とワクチン戦争のゆくえ」
森下 竜一（大阪大学大学院医学系研究科）
- (2) 13:50 - 14:40 「免疫力を上げる免疫フロンティアとしての腸内環境の仕組み」
竹田 潔（大阪大学大学院医学系研究科・免疫学フロンティア研究センター）
- (3) 14:50 - 15:40 「コロナ時代の心を計測する」
春野 雅彦（情報通信研究機構 CiNet）
- (4) 15:40 - 16:30 「大阪府のスマート・ヘルス・シティ戦略について
～ヘルスケア・ライフサイエンス産業を巡る世界都市間競争に、大阪はいかに挑むのか～」
坪田 知巳（大阪府 CIO 兼スマートシティ戦略部）
- (5) 16:30 - 17:00 総合討論

開催報告：

2021 年 5 月 14 日にオンライン・ウェビナーとして開催した第 422 回 CBI 学会講演会について報告する。「With/After 新型コロナウイルス」と題し、新型コロナウイルスに関するホットな各領域において、研究から社会実装までをリードされている 4 名の先生方にご講演頂いた。

最初の講師として、大阪大学・医学部の森下竜一先生から、新型コロナに関わる幅広い知見をご説明頂いた。感染予防のために知っておくべき Tips や、治療薬・各種ワクチンの最新動向、実用化された mRNA ワクチンの有効性や副反応など、多くの方が興味を持つ内容を取り上げ、その話術により聴取者を引き込まれている姿が印象的であった。また、ご自身が臨床応用を進められている DNA ワクチンについては、安定性・安全性面でのメリットのみならず、国内開発の難しさなど、現在直面している課題についても率直にお話下さった。

大阪大学・医学部の竹田潔先生は、感染防御において重要な腸内細菌と獲得免疫系について最新の知見ご紹介下さった。腸内細菌は、ビタミン K などの栄養素の産生以外に、Colonization Resistance と呼ばれる感染防御にも重要な役割を果たしているとのことであった。また、健康状態の維持に加え、近年は疾患発症の原因としても注目されていることを、ご自身の関節リウマチに関する研究成果を交えて非常に分かり易く説明して下さいました。

情報通信研究機構の春野雅彦先生は、ビッグデータと自然言語処理を活用した「社会行動の個人差を生む脳メカニズム」に関するご自身の研究を紹介された。罪悪感回避と不平等回避のバランスの性差や、ウォーターエイド活動（全ての人が清潔な水にアクセスできるようにする活動）での効果的なメッセージの選抜など、ヒトの行動を理

解する上で含蓄に富む内容であった。特に、コロナワクチンの接種意欲を高めるための説明文や、その効果の年齢差などは、コロナ撲滅において非常に重要な知見であると感じた。

大阪府・スマートシティ戦略部の坪田知巳先生は、日本のデジタル化や個人情報利活用の現状、他国の後塵を拝している理由、それらを大阪スマートシティ戦略によってどのように解決・克服して行くか、について体系的にご説明下さった。「大阪スマートシティパートナーズフォーラム」を通じて、各市町村・企業と一丸となって取り組まれている姿勢や、「データヘルスで起業するなら大阪が一番」と言って頂けるように精力的に活動されている姿が印象的であった。さらに、都市免疫力の強化というコンセプトを打ち出し、アフター・コロナに向けた次のステージのビジョンを掲げられていた。

多くの方に関係するテーマと言うこともあり、当日の参加者は 131 名で、質疑応答や総合討論でも活発な議論が行われ、講演会は大盛況のうちに終了となりました。ご講演下さった先生方と、ご支援下さった関係者の皆様に、改めて御礼を申し上げます。

(塩野義製薬(株) 六嶋 正知)



森下竜一先生



竹田潔先生



春野雅彦先生



坪田知巳先生

第 423 回 CBI 学会 講演会

「液 - 液相分離 (LLPS) と創薬」

日時：2021 年 5 月 27 日 (木) 13:30 - 17:30

場所：オンライン配信 (Zoom ウェビナー利用)

世話人: 遠藤 真弓 (大正製薬株式会社)、前野 恭一 (アステラス株式会社)、谷村 直樹 (みずほリサーチ & テクノロジー株式会社)、嶋田 朋嘉 (第一三共株式会社)

プログラム:

- (1) 13:30 - 13:40 開会の挨拶
- (2) 13:40 - 14:30 「創薬標的としての液液相分離と天然変性タンパク質」
廣明 秀一 (名古屋大学)
- (3) 14:30 - 15:20 「相分離生物学」
森 英一郎 (奈良県立医科大学)
- (4) 15:30 - 16:20 「液 - 液相分離の視点で見直すオートファジー」
野田 展生 (微生物化学研究所)
- (5) 16:20 - 17:10 「分子動力学シミュレーションと機械学習を用いた、ペプチド会合性評価」
亀田 倫史 (産業技術総合研究所)
- (6) 17:10 - 17:30 総合討論

開催報告：

蛋白質や核酸の液 - 液相分離 (LLPS) が、細胞内で観察される局所での様々な生命現象に係っていることが近年明らかになってきています。例えば、アルツハイマー、ALS などの神経変性疾患だけではなく、癌においても重要な new biology として着目されています。この分野は、欧米での研究がかなり先行していますが、近年、液 - 液相分離に着目し異常たんぱく質が蓄積する疾患を扱っているバイオベンチャーと外資大手製薬会社との共同研究が開始されており、新しい創薬アプローチとして注目が非常に高い分野となっています。本講演会ではこうした状況を踏まえ、「LLPS と創薬」と題して、相分離が絡む生命現象の研究に対し第一線でご活躍の先生 4 名をお招きし、その基礎から創薬への応用を、最新の研究結果や計算科学的なアプローチを含めご講演いただきました。総合討論では、アステラス製薬の白井宏樹先生に座長をお願い致し、産業利用という観点もあわせ、日本発「相分離創薬」の実現について議論しました。

最初の廣明秀一先生 (名古屋大学) からは、液液相分離や繊維を形成する天然変性タンパク質 (Intrinsically disordered proteins : IDP) に関する基礎から、IDP や液液相分離を積極的に標的とした創薬へのアプローチについて、ご講演いただきました。どの相の分子を標的にするか、あるいはどの相間転移に対し薬剤より介入するのか、各 IDP の細胞内分子機能に即した戦略を立てる必要があることを言及されておりました。また、このような IDP を積極的に標的とした、いわゆる IDP 創薬に対し、ご自身の研究分野でもある溶液 NMR 法による構造解析や分子動力学を活用した創薬手法についてご紹介いただきました。

引き続き森 英一朗先生 (奈良県立医科大学) より、「相分離生物学」と題し、生物学的相分離の基礎から最新のトピックまでご紹介いただきました。相分離は多くの細胞内構造物の構成に寄与しており生命科学現象と深い関わりがあること、タンパク質の天然変性配列の中でも特に Low-Complexity (LC) 配列が重要であることを詳細にご解説いただきました。また、本分野は国際的に大きく進展しており、本邦でもオールジャパンの研究体制構築による新規技術の開発や研究実績の蓄積が望まれ、民間企業との連携も視野に入れた「相分離創薬」コンソーシアム設立と、研究シーズを元にしたベンチャー起業に向けた準備が必要とのご提言をいただきました。



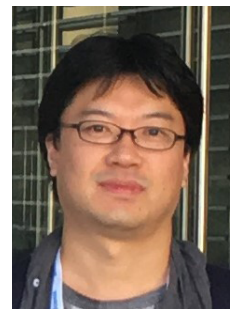
廣明秀一先生



森英一朗先生



野田展生先生



亀田倫史先生

野田展生先生 (微生物化学研究所) からは、相分離と生命科学現象の最前線の例としてオートファジー研究と相分離について、多くの実験結果と共に最近の研究成果をご紹介いただきました。個々の Atg 因子の構造を明らかにしてもオートファジーという現象を理解するには至りませんでした。相分離の概念を取り入れることで、PAS (プレオートファゴソーム構造体) の実体は、Atg1 複合体が相分離した液滴であり Atg13 のリン酸化状態で制御されていること等を示され、「相分離状態の制御」という新しい視点からのオートファジー制御剤の開発の可能性を示していただきました。また、高速原子間力顕微鏡 (AFM) を活用することで液滴に含まれるたんぱく質の形状を観察するなど非常に興味深い実験結果を数多くご紹介いただきました。

最後に、亀田倫史先生 (産業技術総合研究所) からは、分子動力学シミュレーションと機械学習を用いた液 - 液相分離に係るペプチド会合性の評価についての研究をご紹介いただきました。分子動力学シミュレーションによる会合状態のモデリングを踏まえた添加剤による液 - 液相分離のコントロールへの洞察、分子動力学シミュレーションと

機械学習を組み合わせた YFP (黄色蛍光タンパク質) のデザイン、天然変性領域への創薬をめざしたナレッジベースの活用事例などについてご紹介いただくとともに、分子動力学シミュレーション、機械学習、ナレッジベース各々の特徴と活用のポイントについて示唆を頂きました。

当日は、240名以上の方にオンラインでご参加を頂き、いずれの講演においても活発な質疑応答が行われ大盛況となりました。ご講演頂いた先生方、ご協力いただいた方々に、この場を借りて深く御礼申し上げます。

(世話人一同)

第 424 回 CBI 学会 講演会

「プロテインノックダウン法による創薬パラダイムシフト」

日時：2021年6月25日(金) 13:00 - 17:35

場所：オンライン配信 (Zoom ウェビナー利用)

世話人：丸岡 博 (第一三共 RD ノバーレ株式会社)、岡田 興昌 (田辺三菱製薬株式会社)、大原 康德 (日本たばこ産業株式会社)、狩野 敦 (株式会社モルシス)

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:05 はじめに
- (2) 13:05 - 13:55「Targeted Protein Degradation 技術と創薬」
内藤 幹彦 (東京大学大学院薬学系研究科)
- (3) 14:00 - 14:50「神経変性疾患の原因タンパク質分解薬の創製」
石川 稔 (東北大学大学院生命科学研究科)
- (4) 15:05 - 15:35「In silico 手法を利用した PROTAC の設計支援」
神谷 謙太郎 (株式会社モルシス)
- (5) 15:40 - 16:30「セレブロンを標的とする薬剤の分子機構」
伊藤 拓水 (東京医科大学)
- (6) 16:35 - 17:25「RaPPIDS; 独自の新規 E3 リガーゼバインダーを用いた
標的タンパク質分解誘導剤の効率的創薬プラットフォーム」
富成 祐介 (ファイメクス株式会社)
- (7) 17:25 - 17:35 まとめ

開催報告：

近年、新たな創薬モダリティのひとつとして注目されている標的蛋白質分解誘導薬 (Targeted Protein Degradation, TPD) は、プロテインノックダウン法により全蛋白質の 70%以上を占めるといわれているアンドラッグガブルな蛋白質を標的にできる可能性があり、従来の薬物では対応しきれなかったアンメットメディカルニーズを満たす治療薬の開発が期待できます。今回の講演会では、プロテインノックダウン法および TPD に関連する研究開発において第一線で活躍されている 5 名の先生方に、最先端の研究成果や将来展望についてご講演頂きました。

まず、SNIPER の開発者である内藤幹彦先生から、SNIPER 開発の経緯、プロテインノックダウン技術の基礎、そして TPD の今後の展望まで含めて幅広くご講演頂きました。SNIPER は、E3 リガーゼとしてアポトーシス阻害タンパク質 (inhibitor of apoptosis protein, IAP) ファミリーを利用します。プロテインノックダウン技術、IAP ファミリーと IAP 阻害剤の関連性とを交えて SNIPER 開発とその効果について解説頂きました。SNIPER 開発の経緯では、IAP リガンドの構造改変により、in vivo でも効果を発揮する高活性な SNIPER の開発に成功されました。IAP 阻害

剤は抗がん剤としても利用されていることから SNIPER は今後有力な抗がん剤としての開発につながることも期待されています。また、TPD と他の創薬モダリティとの比較・関連性についても解説頂きました。

石川稔先生からは、神経変性疾患における PROTAC の効果を中心に講演頂きました。神経変性疾患の原因と考えられている異常凝集した疾患原因タンパク質に特異的に結合する神経変性疾患診断薬に着目され、神経変性疾患診断薬と IAP リガンドを連結した PROTAC 化合物を設計されました。この PROTAC 化合物により生細胞中でハンチントン病の原因タンパク質である変異ハンチンチンやその可溶性凝集体を減少させることに成功されました。更には、この PROTAC 化合物が複数の神経変性疾患の原因タンパク質の存在量を減少させることも実証されました。

神谷謙太郎先生からは、MOE PROTAC Modeling Tools のモデリング手法とその適用事例について講演頂きました。PROTAC の有効性には、PROTAC、標的タンパク質、E3 リガーゼの 3 要素からなる三元複合体の安定性が重要であることから、複数のモデリング手法により三元複合体構造を発生し、安定性の高い三元複合体モデルを効率的に抽出する機能についてご説明頂きました。適用事例として、PROTAC の相対的な分解誘導性や PROTAC のリンカー設計の遡及的研究において実験値と一致する結果が得られたことを紹介されました。

伊藤拓水先生からは、セレブロンとサリドマイド誘導体、セレブロン・ベースの PROTAC について講演頂きました。2010 年に伊藤先生らの研究グループによりセレブロンがサリドマイドの催奇性だけでなくがん細胞の増殖抑制のメカニズムにも関わることが発見されました。その後、セレブロンとセレブロンモジュレーターであるサリドマイド誘導体の研究が急展開し、レナリドミド、ポマリドミドと言った免疫調節薬 (IMiDs) が開発され、現在、セレブロンを利用した PROTAC の開発に進展しています。セレブロンの発見から現在までの研究成果、そして、今後のセレブロンを利用した PROTAC 開発について解説頂きました。

富成祐介先生からは、独自のプラットフォーム技術である RaPPIDS™ による TPD の開発について講演頂きました。RaPPIDS™ は、独自のユニークな E3 リガーゼバインダーと、自動合成も使用して多様性に富んだ多くの化合物を効率的に合成・探索する技術、およびその化合物のプロパティを改善するための独自のノウハウから成り、TPD の候補化合物を短期間で創出することができます。RaPPIDS™ により多数のプロジェクトを進行されていますが、その中からいくつかの事例についてご紹介頂きました。また、PROTAC 化合物プロファイルの課題を克服する上でのポイントとなる点についても経験を交えて詳しくご説明頂きました。

今回の講演会では、プロテインノックダウン法および TPD について基礎から最新の応用技術まで幅広く情報を共有することができたものと思います。また、参加者の方の関心も高く講演会の時間内では回答できないほどの多数の質問を頂きました。ご講演頂きました先生方には、この場をお借りして深くお礼申し上げます。

(世話人一同)



内藤幹彦先生



石川稔先生



伊藤拓水先生



富成祐介先生

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 427 回 CBI 学会講演会

「ゲノム編集が変革する創薬～基礎から臨床応用まで～」

日程： 2021 年 11 月 19 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：石川 誠（日産化学工業 株式会社）、中村 信二（武田薬品工業株式会社）、
熊澤 啓子（帝人ファーマ株式会社）、緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）、
島田 裕三（富士通株式会社）



委員会報告

創薬研究会運営委員会

第 47 回創薬研究会運営委員会

日時：2021 年 5 月 26 日 (水) 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) 担当者変更について
- (2) 新しい窓口担当者の紹介
- (3) 創薬研究講演会スケジュール確認
- (4) 今後の創薬研究会講演会開催について
- (5) グループ討議 (ブレイクアウトルーム)
- (6) 次回の委員会について

第 48 回創薬研究会運営委員会

日時：2021 年 7 月 6 日 (火) 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) 担当者変更について
- (2) 提案のあった協業・連携の可能性について
- (3) 今後の創薬研究会講演会開催予定について
- (4) 来年度講演会の開催形式について
- (5) 講演会後のオンライン懇親会実施方法について
- (6) 講演会参加者情報の開示について
- (7) 創薬研究会での新規企画に関するグループ議論
- (8) グループ討議 (ブレイクアウトルーム)

関西部会運営委員会

日時：2021 年 8 月 5 日 (木) 13:00-14:30

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 事務局より連絡

- (2) 次回の講演会の開催について
- (3) 次々回の講演会の開催について
- (4) 2022 年度講演会について
- (5) 次回運営委員会の予定

執行部会

第 70 回執行部会

日時：2021 年 5 月 20 日 (木) 18:00-19:30

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：2021 年大会準備の進捗状況報告
- (2) 渉外担当：他学会の後援、会員配信の報告
- (3) 学会誌担当：次号発刊準備、若手の会新コラムについて
- (4) 出版事業担当：CBI 学会出版物の英訳出版の報告
- (5) 編集担当：分野長会議、今後の CBI ジャーナルの方向性について
- (6) 若手の会：学会誌若手の会コラムについて、年会チュートリアルについて
- (7) 研究推進委員会：研究会更新について、大会 FS 開催について
- (8) 創薬研究会：今後の運営委員会、研究講演会の開催について
- (9) CBI 研究機構：創薬研究会での紹介、学会誌への掲載について
- (10) CBI 研究機構：量子構造生命科学研究所キックオフシンポジウム報告
- (11) 事務局担当理事：地方にむけての広報について、学会賞募集要項について、オンライン講演会・大会取材ポリシーについて

第 71 回執行部会

日時：2021 年 6 月 18 日 (金) 18:00-19:30

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：2021 年大会準備の進捗状況報告
- (2) 学会誌担当：第 9 巻第 2 号を発刊
- (3) 学会誌担当：第 9 巻第 2 号を発刊
- (4) 出版事業担当：ISBN 番号の追加
- (5) 編集担当：分野長会議の開催、CBI ジャーナルの方向性について、今後の体制について
- (6) 新規事業担当：新規事業の検討中
- (7) 若手の会：学会誌若手の会のコラムについて
- (8) 研究推進委員会：研究会の活動方針のとりまとめ、新規研究会検討の報告
- (9) 創薬研究会：ファシリテーターによる活性化案、種に取り組む内容の確認
- (10) CBI 研究機構：量子構造生命科学研究所の活動について、シンポジウムの企画について
- (11) 事務局担当理事：CBI 学会規約の修正案
- (12) 学会賞：賞の種類、選考方法の検討、会長選挙について。学会賞について

第 72 回執行部会

日時：2021 年 7 月 15 日 (木) 18:00-20:00

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) 年会担当：2021 年大会準備の進捗状況報告
- (2) 渉外担当：他学会の後援、会員配信の報告
- (3) 学会誌担当：9 巻 2 号公開の報告、次号発刊予定

- (4) 出版事業担当 : 分子ロボットのパンフレットを検討中
- (5) 編集担当 : ・オンライン学術データベース EBSCOhost について、投稿の状況報告
- (6) 若手の会 : 学会誌若手の会のコラムについて、CBI ジャーナル投稿の予定、大会準備状況の報告、SNS の活用
- (7) 研究推進委員会 : FMO 研究会活動計画を報告、補助金の利用について
- (8) 創薬研究会 : AI 創薬ベンチャーとの連携、若手の誘致、講演会トピック選定方法、CBI の認知度向上、窓口担当変更の報告
- (9) CBI 研究機構 : 量子構造生命科学研究所 合同セミナーの報告、大会で FMO 研究会と合同 FS を開催、中性子産業利用推進協議会との合同シンポジウムを開催予定
- (10) 事務局担当理事 : CBI 学会規約の修正、学会賞について、若手奨励賞について、上原賞候補者について

CBI 研究機構

第 4 回運営会議

日時 : 2021 年 5 月 17 日 (月) 18:00- 18:40

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) 量子構造生命科学研究所 5 月 14 日に開催したキックオフシンポジウムについて
- (2) メーリングリストの取り扱いについて

第 5 回運営会議

日時 : 2021 年 6 月 16 日 (水) 18:00- 18:40

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) 量子構造生命科学研究所報告、シンポジウム開催企画について

第 6 回運営会議

日時 : 2021 年 7 月 16 日 (金) 18:00- 18:40

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) 量子構造生命科学研究所報告
- (2) 次世代モダリティー研究所シンポジウム開催企画について
- (3) 人材プールの構築について



編集後記

「会員の皆様、お元気ですか。」と、思わずこのような第一声で、編集後記を始めたくなる状況です。新型コロナウイルスの猛威に言葉が出ません。一方、昨年の編集後記の冒頭で、「会員の皆様、在宅勤務、遠隔講義（送る教員、受ける大学（院）生）と従来の生活パターンから大きく変わった方はどの位おられるのでしょうか。」と記しましたが、「生活パターンが多少なりとも元に戻った方はどの位おられるのでしょうか」、という問いもしたいような今日です。科学が（足り）ない社会を実感します。

さて、本号の巻頭言は、当学会 情報計算化学生物学会 理事長を務められ、学会を牽引されている小長谷先生にお願いしました。「CBI 学会の学会員は異なる専門領域を背景とする。専門分野が異なる研究者が交流することでサイエンスが融合し、技術革新が生まれることが期待できる。このようなサイエンスの融合の場を提供することが CBI 学会の役割であり、そして強みであると考えている。」と述べておられたが、同感である。化学、生物、情報を中心とした諸科学の交差点であり、リアクターとなる学会となるように、その活動を高める学会誌にしなければと感じています。

ホットトピックスでは、本間先生から、in vivo 毒性の予測において、従来型の記述子だけでは学習効果が低いことがあるが、一旦、373 種類の生物活性の予測モデルを作成してその予測値を記述子として使うことによって精度向上が見込めるというご紹介を頂いた。

次号からは、「若手の会」のパワーも入り、徐々にパワーアップした学会誌として行く予定です。（T. M）

CBI 学会誌 第 9 卷 第 3 号

2021 年 9 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 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。

