

CBI学会誌

CBI学会2025年大会

"Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2025"

コンバージェンスが生み出す
未来のライフサイエンス
～融合する化学・生物学・情報科学～



2025
10.27 MON - 10.30 THU

会場 タワーホール船堀
東京都江戸川区船堀 4-1-1

大会長：秋山 泰 (東京科学大学)
実行委員長：関嶋 政和 (東京科学大学)
プログラム委員長：池田 和由 (理化学研究所)



第 13 巻第 3 号

2025 年 9 月 1 日発行

巻頭言

ライフサイエンス企業における
オープンイノベーションに必要な人材とは

坂田 恒昭

大阪大学共創機構／CBI 研究機構次世代モダリティ研究所

私と CBI 学会とのご縁は今から 30 年ほど前、神沼二真先生に依頼されて遺伝子治療の講演を引き受けたことに始まります。情報計算化学生物学会（CBI 学会）とは一体何を目的とする学会だろうかと思いました。何でもありかなと思った記憶があります。ただ思うのはこういうファジーな名前からオープンイノベーションが生まれるのではないかと考えています。

私が前職の製薬企業でオープンイノベーションを始めたのは 25 年ほど前に遡ります。当時の製薬業界は自前主義で社内の研究を製品にまで持って行くという時代でした。そのためにオープンイノベーションを社内で提唱した際には社内の研究部署から強い反対を受けました。ただ当時の会社幹部の決断で国内企業ではいち早くオープンイノベーションに取り組み、現在ではパイオニアと評価されるようになりました。

今後もライフサイエンス企業におけるオープンイノベーションをうまく機能させるには、いわゆるプロデューサー人材が最重要と思います。日本のライフサイエンス企業では、研究の面白さだけでなく、知的財産的視点、経済的視点などの多角的側面から技術の良し悪しを素早く見極めることのできる人材が不足しているといわれています。今後、このような人材、しかもグローバルな視点を持った人材を育てる必要があります。

グローバルな視点というのは世界動向を迅速的確に把握し、世界中のアカデミア・バイオベンチャーの情報を得、交渉できる人材です。特に強調したいのは、オープンイノベーション＝コミュニケーションマネジメントであることです。必要なのは「心の動き」を感じ取る修業を積むことになります。「自分の心」の動き（自分がどういうメッセージを発信するのか）、「相手の心」の動き（それにより相手個人がどう反応するのか）、「集団の心」の動き（組織としてどういう態度を取ってくるのか）を如何に読み解き予想するかが重要なスキルとなります。

海外のベンチャー企業はとにかくプレゼンテーションが上手で聞き手の想像力をかき立てるようなプレゼンテーションを行います。反面、チャンピオンデータを強調するきらいもあり、このあたりをきちんと評価する必要があります。誤解して欲しくないのは、研究をきちんとできる人の育成も必要です。でないと外部研究の正当な評価は不可能です。上手なプレゼンテーション、論文に簡単に騙されてしまうだけです。

各社このような素質を持った人材は数少ないと思われます。私も前職では人材発掘には苦労しました。このような人材は必ずしも理科系出身である必要ではありません。文科系出身でもゲートキーパーとしては理科系人材以上に力を発揮する場合も数多くいらっしゃいます。企業は社員の中からこのような素質を持った人材を見つけ出し、育成する必要があります。

今後戦略、戦術は言うに及ばず、思想、志、ビジョン、人間力を兼ね備えた知性をそなえて、非常に多様化した専門家を統合できる人を育成することが急務です。

このような人材が活躍し、日本のオープンイノベーションが促進されることを期待してやみません。その一翼を CBI 学会に担って頂ければ素晴らしいことだと思います。

目次

(1) 巻頭言	
「ライフサイエンス企業におけるオープンイノベーションに必要な人材とは」	
坂田 恒昭（大阪大学共創機構／ CBI 研究機構次世代モダリティ研究所）	1
(2) ホットトピックス	
「制御因子を見抜く AI：細胞状態を読み解く新手法」	
Xingran Wang（王 星然）、Zi Wang（王 梓）（大阪大学 蛋白質研究所）	3
(3) CBI ジャーナル便り（32）	
江崎 剛史（滋賀大学データサイエンス学部）	5
(4) 紹介 CBI 若手の会	
「2024 年 CBI 大会フォーカストセッション	
計算科学業界のキャリアチェンジに関するアンケート結果の紹介」	6
(5) CBI 若手の会コラム第 15 回 シリーズ企画「若手の会キャリア（第 11 回）」	
「私のキャリアパス紹介」～すべては自分次第である～	
鎌田 真由美（北里大学 未来工学部）	15
(6) 講演会 報告・予告	19
(7) 委員会開催報告	27
(8) 編集後記	29

Hot!!! TOPICS

～最新文献の紹介

制御因子を見抜く AI：細胞状態を読み解く新手法

Xingran Wang (王 星然)

Zi Wang (王 梓)

大阪大学 蛋白質研究所

Xi, X.; Li, J.; Jia, J.; Meng, Q.; Li, C.; Wang, X.; Wei, L.; Zhang, X. : A mechanism-informed deep neural network enables prioritization of regulators that drive cell state transitions. *Nature communications*. **2025**, 16(1), 1284.

<https://doi.org/10.1038/s41467-025-56475-9>

細胞状態の転換を司る制御メカニズムの解明は、システムバイオロジーや疾患研究における中心的な課題の一つである。本論文では、転写因子 (TF) とシス調節エレメント (cCRE) の情報を深層学習に統合し、細胞状態転換を駆動する主要な制御因子を優先的に特定する新規手法「regX」が提案された。

regX は、RNA 発現とクロマチンアクセシビリティを統合した単一細胞マルチオームデータを用い、局所的な転写制御と遺伝子間ネットワークの双方を考慮したモジュール型ニューラルネットワーク構造を採用している。本手法の中核をなすのが「転写活性化行列」(TAM) であり、TF の発現量、cCRE のアクセシビリティ、そして学習可能な TF-cCRE 間の相互作用強度を組み合わせた、遺伝子ごとの調節行列として設計されている。各遺伝子には専用のニューラル・サブネットワーク (gene subnet) が設けられ、この TAM を入力とすることで、その遺伝子の発現量を予測する (図 1)。

さらに、遺伝子間のネットワーク情報はグラフニューラルネットワーク (GNN) により組み込まれており、局所的な転写調節の状態が細胞全体の状態にどう影響するかを、システムレベルでモデリングすることが可能となっている。

特筆すべきは、*in silico* 擾乱解析 (仮想操作による影響評価) を通じて、特定の転写因子や cCRE の活性を変化させた際に細胞状態がどのように変化するかを予測し、その影響度に基づいて制御因子の重要性を定量的に評価できる点である。本手法は、2 型糖尿病 (T2D) の単一細胞マルチオームデータにも適用され、β細胞が正常状態から代償・非代償状態へと遷移する過程に関与する制御因子を高精度に同定することに成功した。既存手法 (SCENIC+, LINGER) に比べて、予測精度と解釈性の両面で一貫して優れた性能を示した。

regX は、従来のブラックボックス型ディープラーニングとは異なり、転写制御機構をモデル構造に組み込むことで、局所的な制御情報とシステムレベルの遺伝子ネットワークを統合的に捉えるという新たな枠組みを提案している。本研究は、単一細胞マルチオーム解析における解釈可能な AI 技術の有効性を示すものであり、将来的には遺伝子制御ネットワークの定量的解析や疾患関連調節機構の解明への応用が期待される。

本論文は、転写制御機構を直接モデル化し解釈可能性を担保するという点で、規制ゲノミクス分野における機構情報統合型 AI の重要な進展例と位置づけられる。今後は、複数の制御因子を同時に操作する組み合わせ擾乱のシミュレーション対応を含め、因果的推論や動的予測へと応用が広がる道筋を示している。

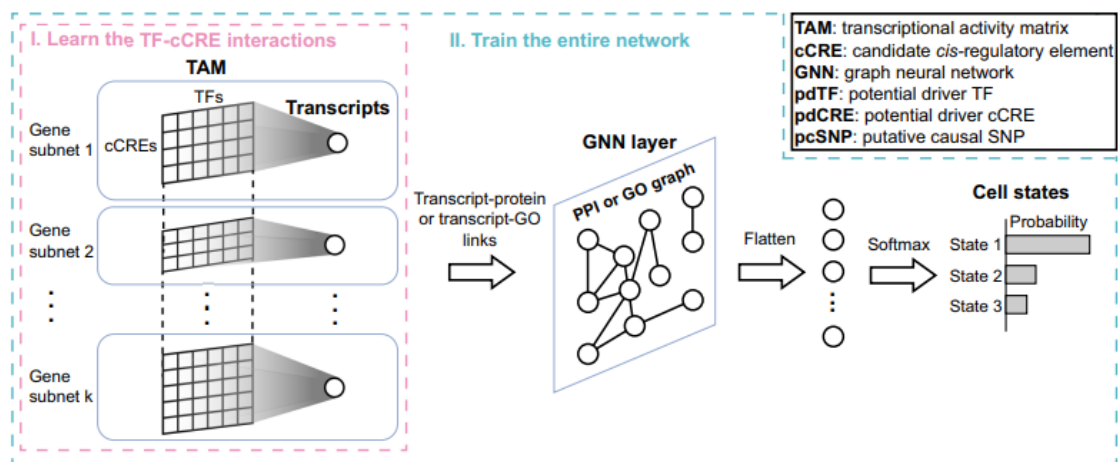


図 1: regX モデルの概略構造と細胞状態遷移の仮想予測フレームワーク

単一細胞マルチオームデータ (RNA 発現 + ATAC) をもとに、転写因子 (TF)、シス調節エレメント (cCRE)、遺伝子間ネットワーク情報を統合したモジュール型ニューラルネットワーク構造。TF-cCRE-gene 間の関係は TAM により入力され、各遺伝子の発現を専用のサブネットワークで予測する。(原著より転載 : CC BY-NC-ND 4.0)

<https://doi.org/10.1038/s41467-025-56475-9>

※図は、原著 Xi, X.; Li, J.; Jia, J.; Meng, Q.; Li, C.; Wang, X.; Wei, L.; Zhang, X. : A mechanism-informed deep neural network enables prioritization of regulators that drive cell state transitions. *Nature communications*, **2025**, 16(1): 1284.

<https://doi.org/10.1038/s41467-025-56475-9> 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

◆ Calculation report

Visualization of Substructure Contributing to Metabolic Stability using Morgan Fingerprint

Morgan Fingerprint を使った代謝に寄与する部分構造の可視化

江崎 剛史¹、渡邊 博文²、清水 祐吾³、渡邊 怜子⁴、土井 雄貴⁵、瀧本 征佑⁶、池田 和由^{3,7}¹ 滋賀大学データサイエンス学部、² 株式会社ウィズメーティス、³ 理化学研究所計算科学研究センター、⁴ 大阪大学蛋白質研究所、⁵ 田辺三菱製薬株式会社、⁶ 日本たばこ産業株式会社、⁷ 慶應義塾大学薬学部

医薬品の開発を支援する目的で、人工知能 (Artificial Intelligence, AI) 技術の活用が推進されており、医薬品としての特性予測や新規化合物の提案など、新薬の提案に向けた手法の開発が進められている。その一方で、これらの AI によって出力された結果は解釈が難しく、特性の改善に向けた提案が困難であるという課題もある。そのため、出力に説明を与える説明可能な AI (eXplainable AI, XAI) の開発も期待されている。

今回の報告では、体内に投与された薬物の挙動を示す代謝に注目し、代謝安定性を予測する際に重要であった部分構造を推定した。Morgan Fingerprint を入力として Random Forest で予測モデルを構築し、テストデータに対して SHapley Additive exPlanations (SHAP) を用いて出力に至った要因の定量的な関係性を算出した。共著者で議論を行いながら、得られた寄与度を構造上に色分けして可視化する方法を検討し、予測に有効であった部分構造を視覚的に確認することができるようになった。

AI を創薬の現場で実用に向けて活用していくためには、変数の重要度を数値だけで表示するのではなく、化学構造上にマッピングするなど、研究者のイメージに繋がりがやすい形で可視化することが不可欠であることを再確認できた。

紹介: 江崎 剛史 (滋賀大学データサイエンス学部)

2025 年 5 月 15 日公開

Chem-Bio Inform. J. 25 (2025) pp. 28-35.

<https://doi.org/10.1273/cbij.25.28>

紹介

CBI 若手の会

2024 年 CBI 大会フォーカストセッション

計算科学業界のキャリアチェンジに関するアンケート結果の紹介

熊澤 啓子¹、高橋 一敏²、渡邊 怜子³

¹ 帝人ファーマ株式会社

² 味の素株式会社

³ 大阪大学蛋白質研究所

近年、研究分野におけるキャリアの多様化が進み、アカデミアと企業、さらにはウェット（実験中心）研究とドライ（計算・解析中心）研究の両研究領域間での移行が注目されています。

2024 年秋に CBI 若手の会では、ドライ研究に関心のある研究者やキャリアチェンジを検討している研究者、将来研究者になる若手の方々が、より意識的に将来のキャリア選択を行い、自分に合った働き方を見つけるための参考になることを目指し、アンケート調査を実施しました。

今回の調査結果では、両研究分野（ウェット / ドライ）や所属（企業 / アカデミア）にはそれぞれメリットとデメリットがあり、生活面と研究へのこだわりのトレードオフが存在することが示唆されました。すなわち、キャリアチェンジが単なる職場の移動や業務内容の変更にとどまらず、研究者自身の価値観や人生観に基づく自己実現や研究の新たな可能性を切り拓く重要なプロセスであることを浮き彫りにしています。今後、ウェットとドライ、アカデミアと企業の垣根を超えた交流が、研究の発展と社会貢献に寄与することが期待されます。そのためには、分野や立場の違いを越えて互いの視点を尊重し合い、多様な価値観を取り入れた協働のあり方が一層求められることと思います。また、長期的な科学の発展や技術革新の基盤となる基礎研究の質を維持・向上させ魅力的な研究環境にしていくためには、アカデミア研究における労働環境の改善が不可欠と考えられます。長時間労働や不安定な雇用形態といった課題に対し、制度的な整備や支援体制の強化を図ることで、研究者が安心して研究に集中できる環境を整える必要性が改めて示されたのではないのでしょうか。

調査結果は 2024 年の CBI 大会でのフォーカストセッション「計算科学業界のキャリアチェンジについて語ろう～ウェットからドライ、アカデミアから企業～」にて、実際にキャリアチェンジされた研究者の方の体験談も交えて紹介いたしました。今回の記事は、当日のアンケート結果の紹介プレゼンテーションを再編したものです。

回答者のバックグラウンド :

CBI 学会学会員、CBI 若手の会会員、CBI 若手の会 Slack 登録者、日本環境変異原ゲノム学会会員の方にご協力いただき、ウェット研究、ドライ研究、両方の研究経験を持つ研究者の方々に、それぞれの違いやキャリア、ワークライフバランスに与える影響などについて 136 名の研究者からご回答いただきました。30 代～ 40 代の男性が多い傾向でしたが、所属や年代、性別など多様なバックグラウンドを持つ参加者から貴重な意見が寄せられました。(図 1)

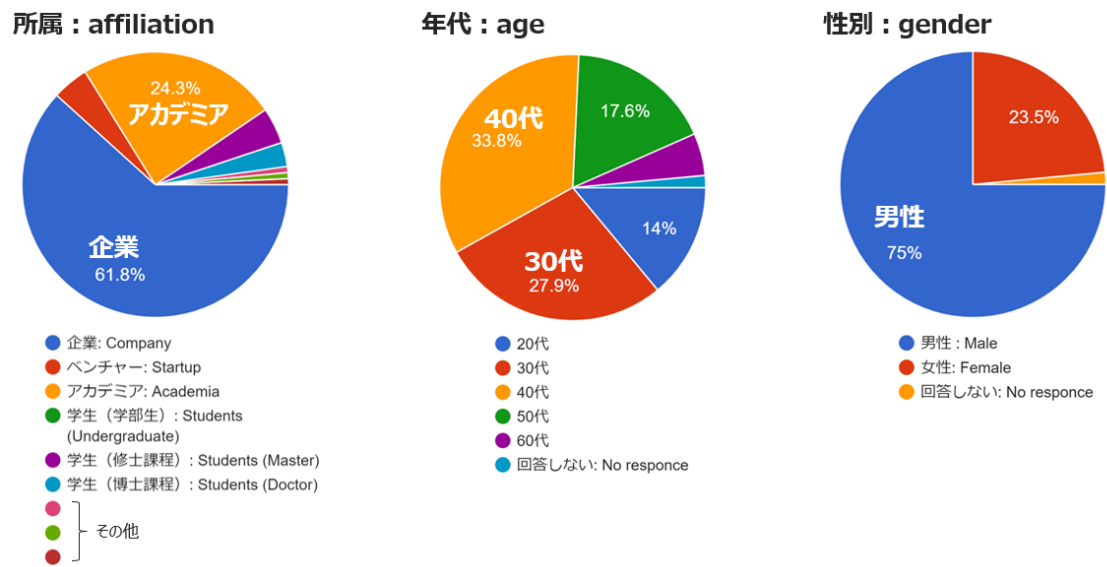


図 1. 回答者のバックグラウンド

今回 10 人の学生の方からもご回答をいただきましたが、将来の希望としては企業とアカデミアの両方がほぼ均等、ウェット研究とドライ研究に関しては、現在ドライ研究に従事されている背景からか、両立もしくはドライ研究が同数という結果となりました。(図 2)

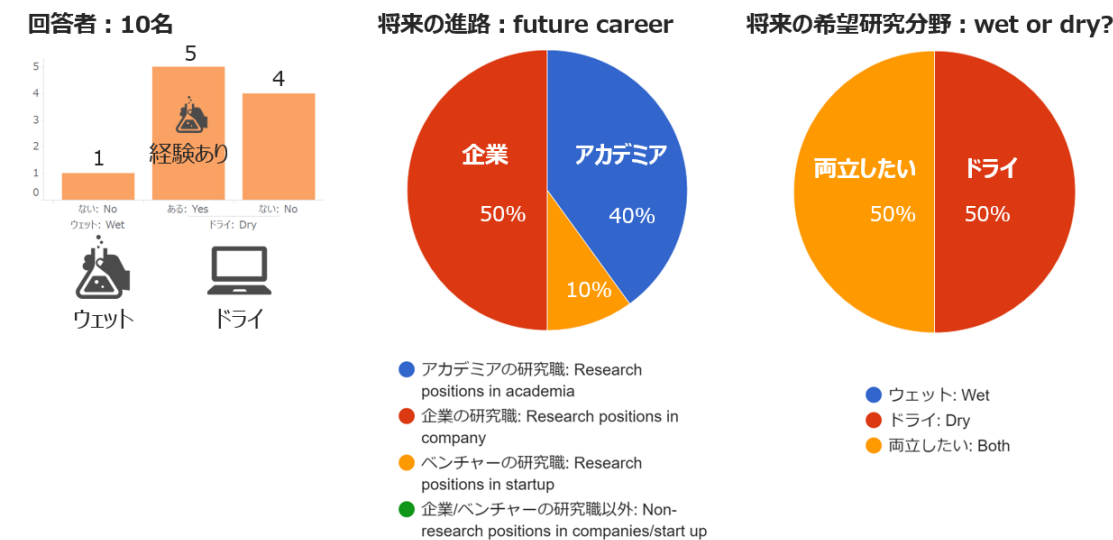


図 2. 学生回答者の希望進路と研究分野

学生の方も含めた全回答者の多くは両方の研究経験を有しており、現業務ではドライ研究の割合が高いという結果でした。それぞれの将来像として、何歳まで実務に携わるかは大きな差は確認されないものの、比率ではドライ研究者の方がやや年齢層が高い結果となっていました。（図 3）

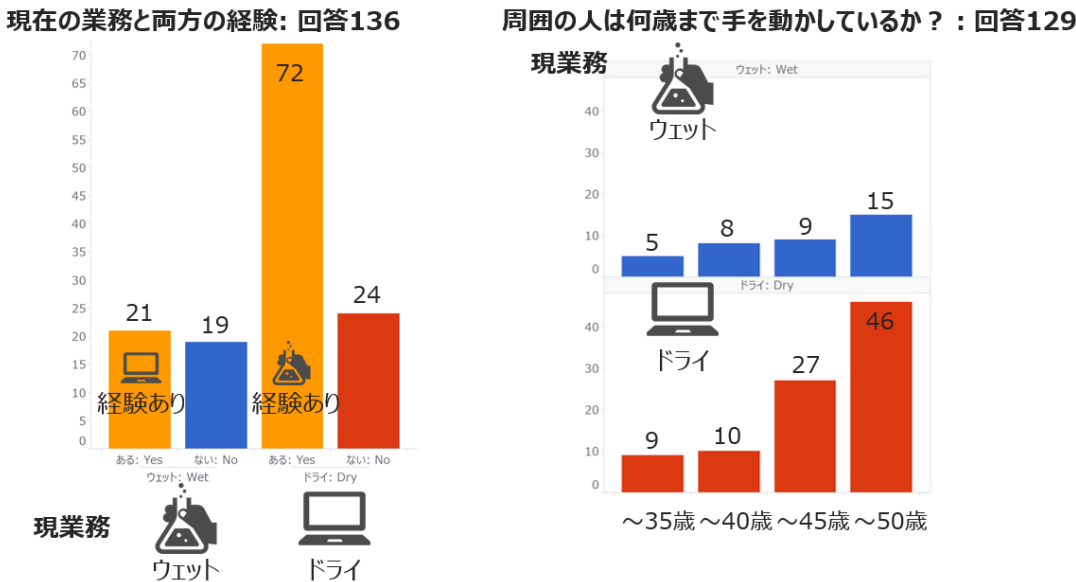


図 3. ウェット研究とドライ研究の経験状況と将来像

ウェット研究⇔ドライ研究のキャリアチェンジ:

調査では、ウェット研究 / ドライ研究双方の研究者からのメッセージ（図 4）、それぞれの研究への興味（図 5）、キャリアチェンジの体験談（図 6）、キャリアチェンジを考える研究者へのメッセージ（図 7）についてうかがうことができました。



ウェット研究者から

- ・ドライとウェットは研究の両輪
- ・ウェット研究も経験すべき
- ・Wet研究よりはdry研究の方がワークライフバランスは保たれていると思う。
- ・ウェットな研究しかできない技術者はドライ研究者と友だちになりたいと心底思っています、と伝えたい。元・ウェット、今・ドライの方ほど、この両方の界面づくりに熱心ではないと感じます。
- ・生物系の特徴を知ってほしい
- ・ドライ研究をする上で、ウェットの段階ですべき注意点や問題点があれば教えてほしい
- ・ソフトウェア内で使用されている専門用語が、生物学的に不適切な場合がとて多い

共通のポイント

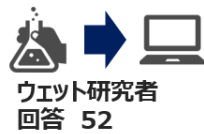
1. 相互理解の難しさ
2. 相互理解の重要性
3. 対話の必要性



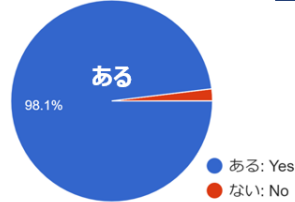
ドライ研究者から

- ・ドライ研究も経験すべき
- ・既存の方法だけではなく新しいことを取り入れてほしい。変わることを恐れなくてほしい。
- ・dryをどうせと思わず協同してほしい。
- ・互いの目的ゴールを理解し、内容についてコンセンサスをとれるようなディスカッション
- ・そのためにウェット研究者もドライ研究者も互いにわかる言葉で話し合うことが重要
- ・実験でデータを取る前に、計画段階からドライ研究者と密にコミュニケーションするとい
- ・ドライ研究との協業無くしてはデータドリブンな研究推進は難しくなってきました。忙しいとは思いますがドライ研究者との対話を続けてください。

図 4. ウェット研究 / ドライ研究双方の研究者からのメッセージ

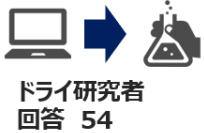


ドライ研究への興味

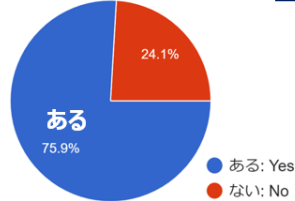


ウェット→ドライの分野転向に感じる壁

1. プログラミングスキルの習得 (79.6%)
 2. 数学的な知識 (65.3%)
- ・ 研究デザインや出てきた結果の妥当性を評価できない
 - ・ 学習にかかる時間・コスト
 - ・ **特に壁は感じない**



ウェット研究への興味



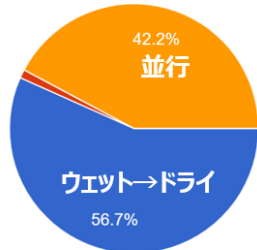
ドライ→ウェットの分野転向に感じる壁

1. 実験手法の習得 (80%)
 2. 生物学の知識 (44%)
- ・ 時間、場所、設備、予算に拘束される
 - ・ 修得までの期間が長い
 - ・ ウェット→ドライより**ドライ→ウェットの方がハードルが高いイメージ**

習得にかかる時間は双方懸念もドライ→ウェットの方がハードルが高いイメージあり

図 5. ドライ研究 / ウェット研究への興味

キャリアチェンジ経験者 : 回答90



- ウェット→ドライ: From wet to dry
- ドライ→ウェット: From dry to wet
- どちらも並行している: Both in parallel

キャリアチェンジした時に感じた困難

- ・ プログラミング**スキルの習得**
- ・ 知識が全くなかった又は独学だったことから、ドライ研究の用語の理解やドライ研究手法の限界の把握に困難
- ・ 業務とは別に自身でスキルを身につけなければならない、**時間**がなかなかとれない
- ・ Dry知識の不足・周囲にDry知識に関するのを聞ける人がいない、教えてくれる人がいない
- ・ 計算研究を行う上で必要な知識とスキルを得るための**学習プログラム**が少ない
- ・ 異分野（物理）からの挑戦でウェットの研究者との**意思疎通**が難しかった
- ・ ドライ系も物理、理工、統計などで考え方が全く異なる

両方の知識を持っていて役立ったこと

- ・ 両者に理解を示して話ができる、情報の**橋渡し**ができる事
- ・ お互いの苦労・難しさを想像できる
- ・ ウェットの現場の目線を持ちながら、問題を論理的に解決する方法を立案できる
- ・ お互いの研究思考と限界が分かる
- ・ **考察が豊か**になった
- ・ 周囲と違う視点から発案できた
- ・ データクリーニングの際に、不適切なデータの特定制がスムーズにできた
- ・ 実践的で意味のある計算科学の研究課題を設定できる
- ・ モデル構築の際にウェット研究で得られた情報がいかせる

図 6. キャリアチェンジの体験談



1. 技術と知識の習得
2. 学習環境が整っていない
3. 異分野同士の意思疎通



1. 相互理解による橋渡し
2. 他とは異なる視点や考察
3. 業務の効率化

キャリアチェンジを考える研究者に伝えたいこと

- ・まずは触ってみるでも問題ないと思うので気軽に飛び込んで良い
- ・ダブルメジャーと考えるべき、どっちつかずが最も良くない
- ・ウェット研究者とのコミュニケーションを忘れずに
- ・両方やれた方がよいと思います
- ・ウェット研究者の考え方を理解しようと努めることで、受け入れられる
- ・ドライ研究とウェット研究は車の両輪。どちらが欠けても科学は発展しない

ドライもウェットも両方重要！

図 7. キャリアチェンジを考える研究者へのメッセージ

ウェット研究は、実験技術の習得や生物学的知識の深化を通じて創造性を発揮できる反面、時間や設備、予算などの面で制約が多いとの声があります。一方、ドライ研究はプログラミングや数学的スキルの習得が求められるものの、比較的ワークライフバランスが保たれやすいとの評価が目立ちました。また、両方の経験を持つ研究者は、互いの知見を活かしながらコミュニケーションを重ねることが、問題解決や新たな研究の発展につながる点について言及しています。両分野の経験を積み、どちらか一方に偏らずにコミュニケーションを継続することが研究発展の鍵とされています。

企業⇄アカデミアのキャリアチェンジ：

アカデミアと企業間のキャリアチェンジに関しては、アカデミアから企業への転向が多いものの、年齢が上がるにつれて企業からアカデミアへの転向も見受けられました。(図 8) また、企業⇄アカデミアのキャリアチェンジを考えたことがあると回答した研究者は、現職がアカデミアである割合が高く、考えていない人は現職が企業である割合が高いことが確認されました。(図 9) 企業では、明確な研究目標や安定した収入、福利厚生などが魅力とされる一方、アカデミアは自由な発想と独自の研究テーマの追求が評価されるものの、任期や資金面での不安が課題とされています。双方の特徴を理解し、柔軟なキャリア形成を実現するためには、対話や情報共有が不可欠であることが示唆されました。(図 10)

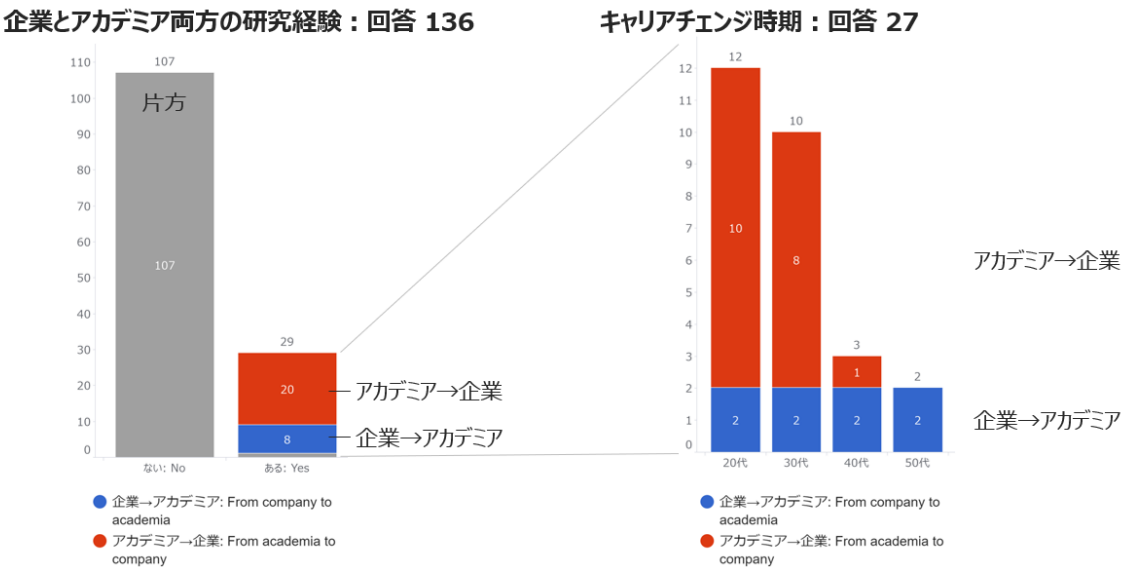


図 8. 企業⇄アカデミアのキャリアチェンジ

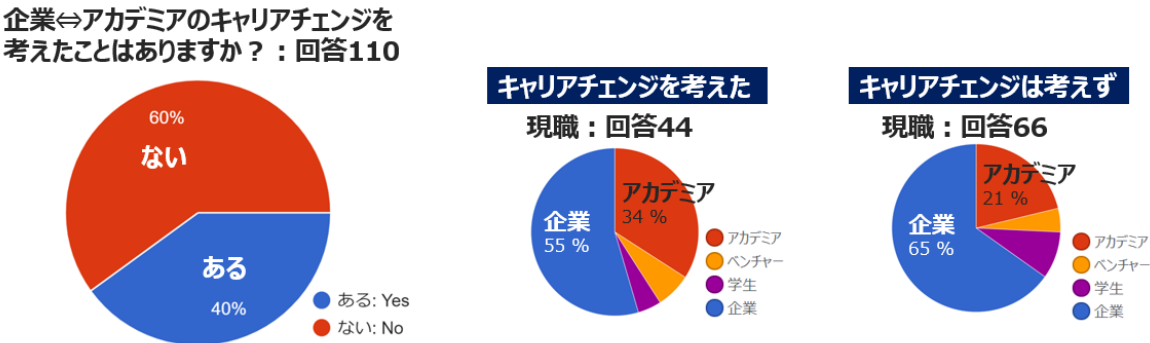
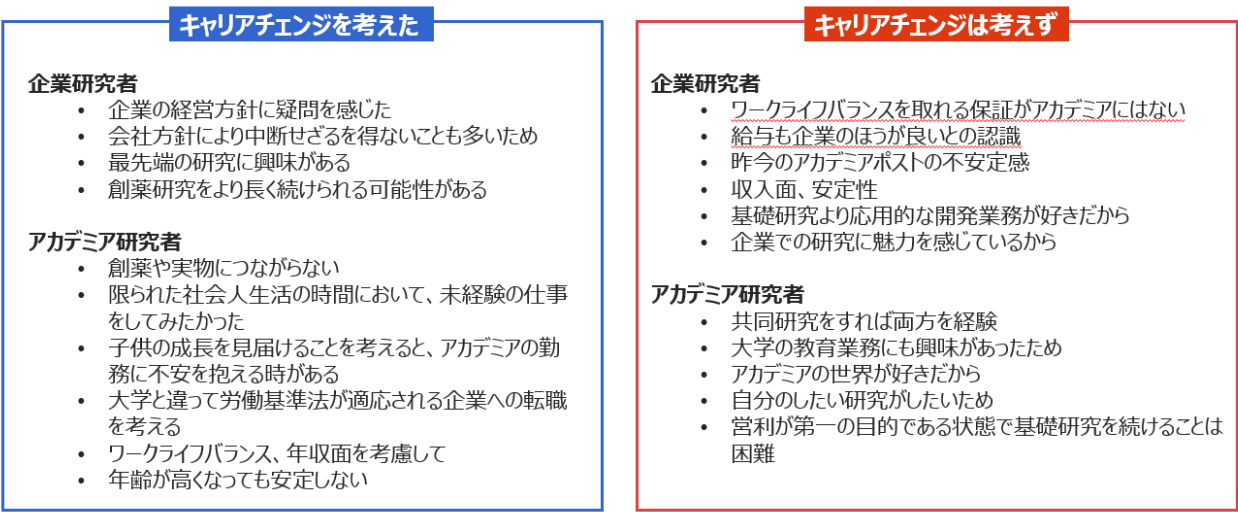


図 9. 企業⇄アカデミアのキャリアチェンジの可能性



生活面と研究へのこだわりの2つの側面：

- 生活面：収入、安定、家族、ワークライフバランス
- 研究へのこだわり：基礎/応用、“したい研究”、研究者でいられる期間、教育業務への関わり

図 10. 企業⇄アカデミアのキャリアチェンジに対する印象

働き方について：

働く上で重要視していることを、その他自由記述を含めた 10 の選択肢から 3 つまで選択可能としてご回答いただきました。その結果、やりがい、自身のやりたい仕事、ワークライフバランスが top3 となりました。（図 11）研究者の背景毎に分布を確認すると、ウェット研究者 / ドライ研究者の間では分布は類似しているものの（図 12）、現職（アカデミア / ベンチャー / 学生 / 企業）では分布が少し異なり、それぞれの重要視していることが職場の選択に影響を与えている可能性が示唆されました。（図 13）

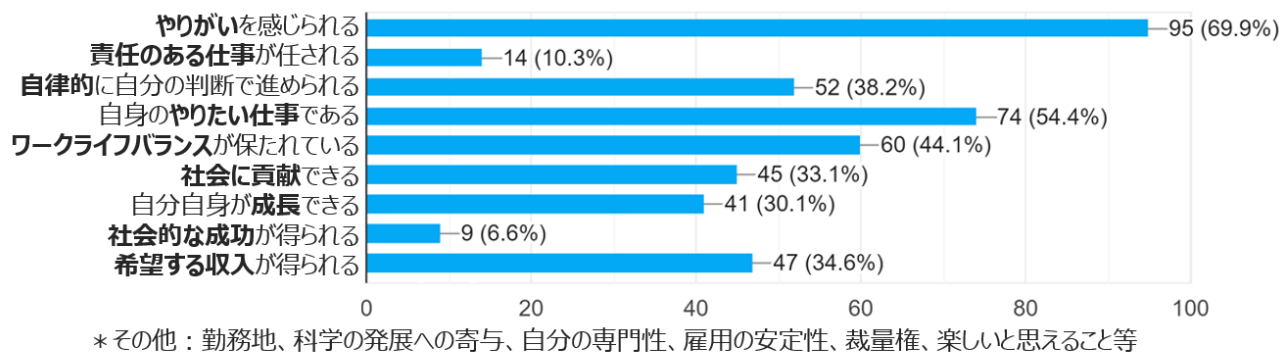


図 11. 働く上で重視するポイント（1 人最大 3 つまで選択）

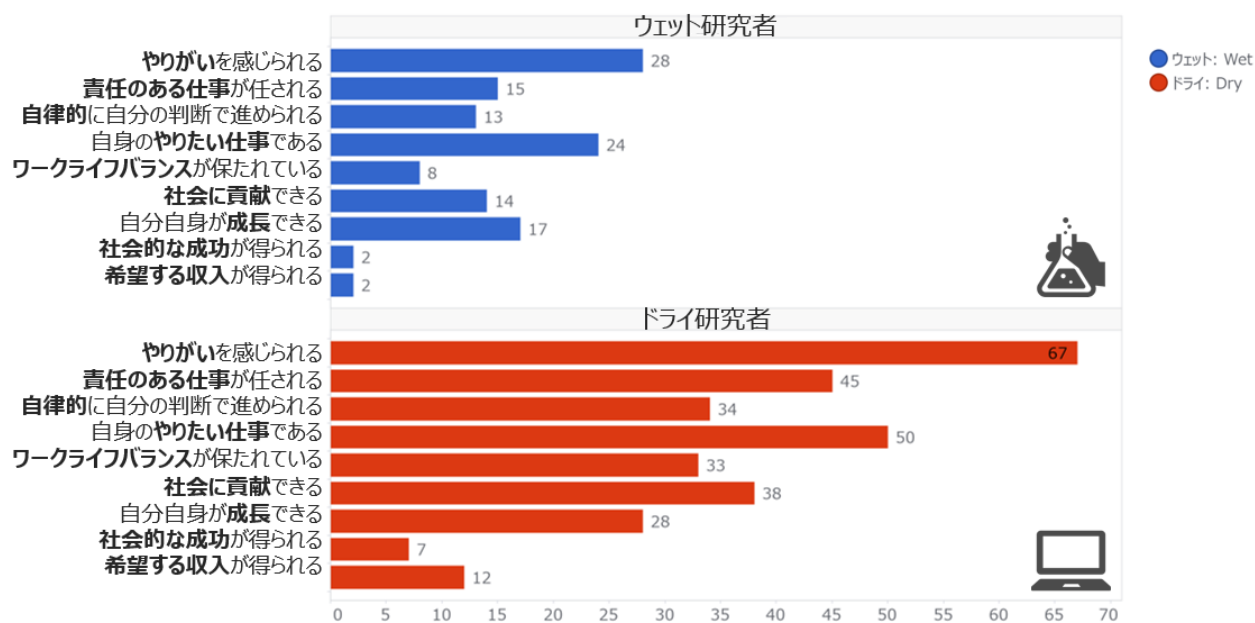


図 12. 研究別働く上で重視するポイント

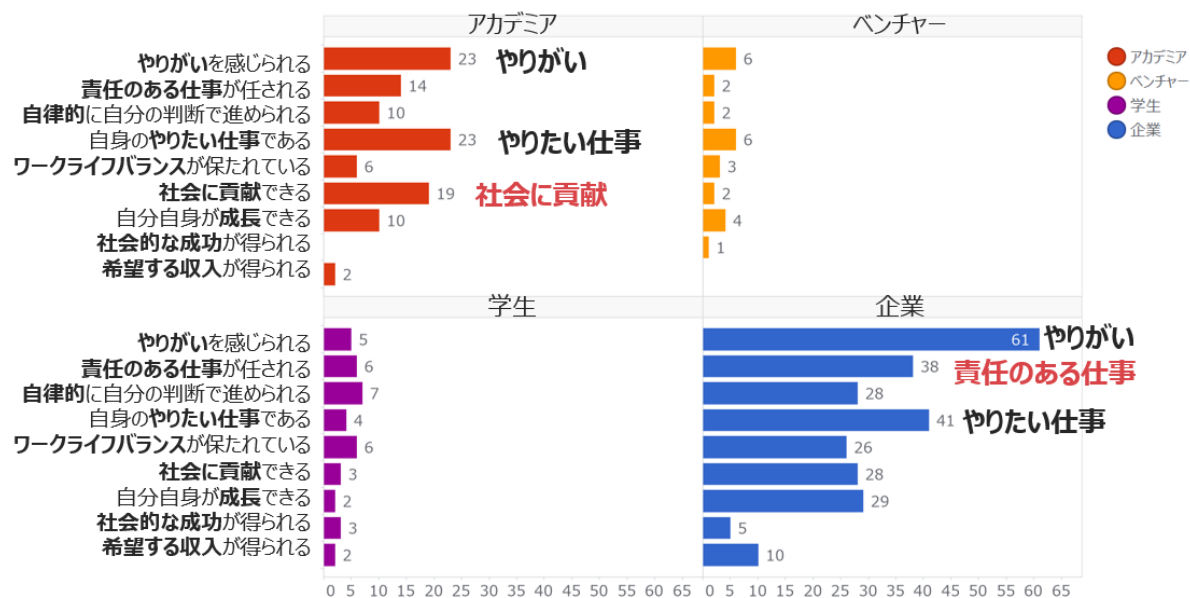


図 13. 所属別働く上で重視するポイント

また、実際のワークライフバランスについては、ウェット研究やアカデミアではワークライフバランスが十分に保たれていないとの声が多く、ドライ研究や企業では比較的良好な評価結果となっていました。（図 14）

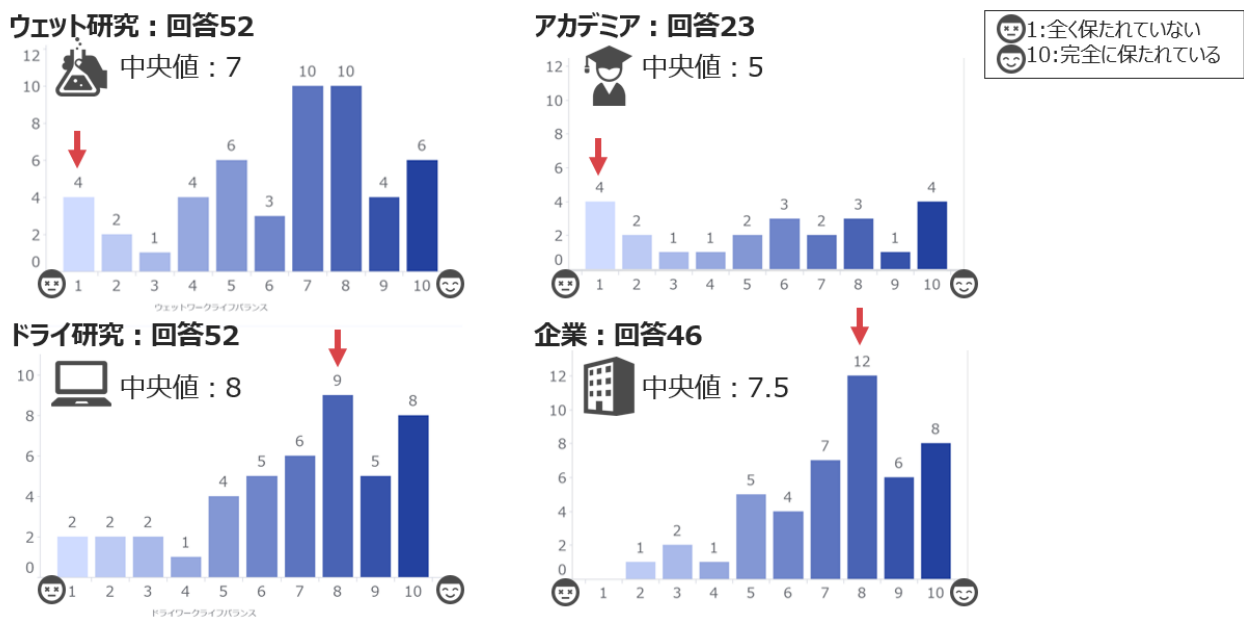


図 14. ワークライフバランス評価

今回の調査結果は、研究分野や所属の違いにより生活面と研究面でのトレードオフが存在することを示唆しており、キャリアチェンジは研究者の価値観や人生観に基づいた自己実現のプロセスであることが浮き彫りとなりました。今後、分野や立場を超えた交流が研究の進展と社会貢献に寄与することが期待されるとともに、協働のあり方として多様な価値観を尊重することが求められることと思います。また、特定の分野や所属での長時間労働や不安定な雇用に対する支援体制強化が求められていることが示されたのではないのでしょうか。



CBI 若手の会について

CBI 若手の会では、年会の企画や学会誌のコラムなどを通して、若手研究者に役立つ情報をお届けしています。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。





CBI 若手の会コラム (第 15 回)

シリーズ企画「若手の会キャリア (第 11 回)」

「私のキャリアパス紹介」

～すべては自分次第である～

鎌田 真由美

(北里大学 未来工学部)

はじめに

ひとえに運がよく、人とのつながり、ご縁に助けていただいて今の自分があります。今回のコラムのお話を機会に、自分がどのように今に至ったのかを思い返してみましたが、改めてたくさんの人に支えていただけてきたことを実感しました。思い返せば、私が進路に悩んだ時、自分の選択を良かったことにできるのは自分しかない、「すべては自分次第である」との先輩女性研究者の言葉に意を決することができました。このキーワードはその後の様々な選択の場面で私を後押ししてくれました。キャリアパスを語れるほどの立場ではありませんが、多様な女性研究者の話を、とお声がけをいただきましたので、こんな人もいるんだと思っていただけたら幸いです。

これまでの軌跡

大学では情報科学を専攻し、研究室配属でバイオインフォマティクスに会い、現在はゲノム医療を中心に、バイオインフォマティクス研究に携わせていただいております。ただ、これは全くの想定外でした。幼い頃から医学や生命科学に興味があったので、それに関連した学部のある大学を受験しました。しかし勉強がとても嫌いだったので、志望した大学は全滅。どうしようかなと思っていたところに偶然、予備校のチューターさんとの会話に出てきた“情報学”に「ありかも」の軽い気持ちで受験を決め、情報科学科に入学しました。

大学で学ぶアルゴリズムやプログラミングは楽しかったです。ただ、やはり生命科学系で学びたいという気持ちが捨てきれず、他大学医療系学部の3年次編入試験を受けました。しかし試験当日の口頭試問では、ちゃんと専門知識を身につけた方がいい、といった内容のことを言われたことくらいしか記憶がなく、帰り道すぐ落ち込んだことを覚えています。もちろん不合格でした。そこから日が空かないうちに、研究室配属を決める時期になりました。そのときに声をかけてくださった先生（後の指導教員）に、編入試験を受けていたことや生命科学に興味があることを伝えると「バイオインフォマティクスって分野があるよ」と教えていただきました。そんな分野があるのか！面白そう！と、その先生の研究室に行く決意をしました。現在までにいくつものターニングポイントがありましたが、これがいちばん大きなターニングポイントだったかもしれません。

最初に取り組んだ研究は、酵母菌の細胞シミュレーションでした。酵母菌のことは全く知らなかったのですが、生物科の先生の下に通ってアドバイスをいただきながら、苦手な英語論文と今のように簡単ではないツールのインストールに四苦八苦しながら研究に取り組みました。でも、それがとても楽しかったようです。なので、特に何も考えることなく修士課程に進学。修士課程では先輩から引き継いだ研究、分子動力学計算に基づくタンパク質の機能解析に取り組みました。修士課程でさらに研究が楽しくなり、博士課程進学を考え始めました。そもそも博士進学が選択肢にあったのは、ともに博士号をもつ両親の影響が大きいと思います。私の母は大学で働く研究者でした。学部卒でしたが、私が幼い頃に働きながら、そして子育て

をしながら論文博士として学位を取得しました。そんな母に憧れていたのが、博士進学やアカデミアの道を決意する一番の要因だったと思います。しかしここで、このまま母校の博士課程に進むか、バイオインフォマティクスを専門とする他大学の研究室に挑戦するか悩み始めます。そして、当時よく相談に乗っていた女性研究者の先輩に、「行った先で、これで良かったと思えるように頑張ればいいんだよ」と言っていただいたことで心が決まり、京都大学のバイオインフォマティクスセンター（BIC）に進学しました。「すべては自分次第である」これは今でも自分の中の大事な言葉になっています。

BIC は 3 つの研究室で構成されており、ここで、今も関わりのある研究者の方々と出会うことができました。博士 1 年時に、若手研究者インターナショナル・トレーニングプログラムで、ドイツ ベルリン自由大学の Ernst-Walter Knapp 先生の研究室に 3 ヶ月研究留学をさせていただきました。ケモインフォマティクス中心の研究室でしたが、機械学習における特徴量選択に関する研究に取り組みました。研究室には、エジプトやトルコ、イタリアなど様々な国から学生やスタッフが来ていました。日本と違うなと感じたのは、職位や立場に関係なく対等に議論していることや、同じ博士課程でも学生という感覚ではなく、専門家として（お給料をもらいながら）研究に取り組んでいることでした。大変幸運なことに、博士課程 3 年次にも、再度、Knapp 研究室に 3 ヶ月滞在させていただくことができました。この時は、ドイツの複数の大学による博士課程プログラムのイベントにも参加することができました。その時にできた友人たちの多くは、修士取得後 1 年くらいは世界へ放浪の旅に出たり、企業で働いたりして、その後 Ph.D. プログラムに応募していました。日本では進学の流れが決まっているように思っていたので、とても新鮮に感じましたし、「こうでなければならない」ことはないのだと、なんだか心が楽になりました。

帰国後まもなく、博士論文公聴会の時期が近づいてきました。今思うとあまりに無謀ですが、博士課程終了後のことは全く何も考えておらず、まあなんとかなるだろう、ちょっと休んでもいいかもくらいの気持ちでいました。そんな状況でしたが、幸運にも、研究室の先輩からポスドクを募集している研究室があると声をかけていただき、雇っていただけることになりました。そして、これが現在にもつながる榊原康文先生との出会いとなりました。

慶應義塾大学ではポスドクとして、初めてゲノム解析の研究に関わることになりました。納豆菌の表現型と遺伝型の関係を明らかにするため、ゲノム配列決定と比較ゲノム解析を行いました。ゲノム解析に触れたのはこれが初めてでしたが、ゲノムの違いが表現型の違いに繋がることに魅力を感じ、これが現在のゲノム医療に関わりたと思うきっかけとなっています。研究だけに集中できるとても有り難い環境で、楽しく研究をさせていただきました。また、ポスドク時代は初めての東京暮らしでしたが、研究以外の様々な分野の友人と広く繋がりを築くことができました。楽しい研究・東京ライフを過ごしていましたが、私的な理由もあり、関西に帰りたいと思うようになりました。本当にタイミングってあるなと思うのですが、たまたま参加した研究会で偶然博士課程時代の先輩に遭遇し、関西でのポスドクポジションをご紹介いただきました。それが京都大学 奥野恭史先生の研究室でした。

大学附属病院の臨床医の先生とのがんゲノム解析に取り組む中、現在につながる大きな出来事は、2016 年の暮れに始まった AMED の臨床ゲノム統合データベース整備事業でした。がん・難病・感染症・認知症など疾患領域の研究者からデータを集め、公開データベースを開発するプロジェクトでした。どんなデータがあるのか、どうやってデータを提供していただくかを議論するところからのスタートでした。実際に先生方を訪ね、直接お話をさせていただきながらデータベース開発に取り組みました。この事業を通して、多くの尊敬する先生方に会え、今もそのご縁から様々なプロジェクトに関わらせていただけるようになりました。時を同じくして、准教授選考に挑戦させていただくことに。医療データサイエンティスト育成を目的とした講座のポジションだったので、情報学の博士号を持っていることが強みになりました。「ありかも」で選んだ情報学でしたが、それが必要とされる時代に今の自分があり、タイミングと運が良く、そしてサポートしてくださる先生方に会えたことで、准教授として採用いただけることになりました。しかし、採用が決まった時は自分なんかでいいのだろうかと悩みました。そのとき奥野先生から、足りないのは経験だから、たくさん経験を積んで、しっかり付いてきてくださいと言葉をかけていただきました。

その言葉がとてうれしくて、たくさん経験をしよう、挑戦しようと思心に決めました。それから 8 年間、本当に多くの挑戦の機会をいただき、経験を積ませていただきました。これには感謝以外に言葉がありません。経験を通してしか得られない人脈も築くことができました。ただひたすら、目の前の課題を追っていましたが、そんな折、東京でのポストドク時代のご縁から、現在の北里大学未来工学部の立ち上げに関わらせていただく機会を頂戴し、現在に至ります。

学位：2013 年 博士（情報学） 京都大学

経歴：

2008 年	奈良女子大学 理学部 情報科学科 卒業
2010 年	奈良女子大学大学院 人間文化総合科学研究科 修士課程 修了
2013 年	京都大学大学院 情報学研究科 博士課程 修了
2013 年～ 2015 年	慶應義塾大学 理工学部 生命情報学科 特定助教
2015 年～ 2016 年	京都大学医学部附属病院 寄附講座 特定研究員
2016 年～ 2017 年	京都大学大学院 医学研究科 特定研究員
2017 年～ 2024 年	京都大学大学院 医学研究科 准教授
2024 年～	北里大学 未来工学部 教授

若手研究者に伝えたいこと

大学受験や編入試験など、恥ずかしいお話を綴ってしまいましたが、様々なタイミングで、自分が希望した道に進めないことが多くありました。その時はもちろん落ち込んでいましたが、今となっては今の道で本当に良かったと思っています。そう思うと本当に不思議なものです。

性別に関係なくですが、特に女性は様々な節目が重なることもあり、決断に悩むことが多いと思います。私も一度東京から関西に帰ったのもそういったタイミングでした。でもその行動が結局は今の自分へと導いてくれていると思っていますので後悔はありません。人に何かを語れる立場ではないのですが、自分が優先すべきだと思うことがあるのであれば、それを優先することが大事なのではないかと考えています。

また、博士課程の進学で悩んだ時に先輩がかけてくださった言葉 一何かを選択しないといけない時、その選択（判断）が良かったと思えるように頑張る—「全ては自分次第である」が、今も自分の根本にあるなと思っています。何か困難にぶち当たったとして（落ち込むこともたくさんあります）、これも経験だと捉えるか、しなければよかったと後悔するのか、それを決めるのは自分だなと思っています。なので、私はいつも「すべては自分次第」と言い聞かせながら、なんでも経験だと思うようにしています。いつまでもそんなことを言っているのは ... とお叱りもあるかもしれませんが、やはりいつまでも、気軽な気持ちでいろんなことに挑戦するのがいいのかなと思っています。





CBI 若手の会コラム担当通信

今回は北里大学の鎌田真由美先生に「私のキャリアパス～すべては自分次第である～」のタイトルで寄稿して頂きました。人生の様々な節目で選択を迫られることは必ずみなさんが経験することですが、どのような選択をしたとしても結果は自分の考え方次第であるということが根底である、ということは、これから選択の時を迎える若手研究者のみなさんの参考になる考え方だと感じました。

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「CBI キャリア第 12 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	(味の素株式会社)
渡邊 怜子	(大阪大学)
朴 鐘旭	(医薬基盤健康栄養研究所)

講演会 報告・予告

第 464 回 CBI 学会 講演会

「アロステリック制御の解明と創薬への新たなアプローチ」

日時：2025 年 5 月 29 日（木）13:00 - 17:20

会場：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：大原 康徳（日本たばこ産業株式会社）、奥田 歩（興和株式会社）、村崎 広太（田辺三菱製薬株式会社）

プログラム：

(1) 13:00 - 13:05 はじめに

(2) 13:05 - 13:45

「アロステリック調節薬による μ オピオイド受容体の活性化機構」

今井 駿輔（理化学研究所）

鎮痛作用を司る G タンパク質共役型受容体 m オピオイド受容体 (MOR) は、モルヒネなどのオピオイド鎮痛薬の作用点である。MOR にはこれらのオルソステリックリガンドの他にアロステリック調節薬が知られており、その活性発現機構を明らかにすることは新たな作用機序を持つ新規鎮痛薬の開発に資する重要な課題である。本発表では、溶液 NMR 法を用いた解析によって、MOR が活性の異なる 3 構造間の平衡状態にあり、アロステリック調節薬はこのうち最も活性の高い構造の存在比を上昇させることで従来のオルソステリックリガンド単独では達成できないレベルに活性を高めることを明らかにした成果について紹介する。

(3) 13:45 - 14:25

「リン酸化酵素を標的とした解離の遅い低分子阻害剤の同定と評価」

喜井 勲（信州大学）

臨床試験を通過して承認されている低分子阻害剤は、標的とするリン酸化酵素からの解離が遅い傾向にある。しかし、共有結合を用いずに、このような解離の遅い阻害剤を狙って設計することは未だ困難であり、合理的な設計概念とその探索・評価技術が求められている。本講演では、リン酸化酵素 DYRK1A をモデルとして、抗体と抗原の結合なみに解離の遅い低分子阻害剤の探索とその特徴や評価技術について紹介する。加えて、解離速度を指標とすることで、近縁の類似リン酸化酵素との選択性を担保できることも紹介する。

(4) 14:30 - 15:10

「アロステリック創薬のための SKY プロットの開発」

白木 琢磨（近畿大学）

アロステリーという現象は様々な意味で使われるため整理しておきたい。いわゆる Jacob & Monod が 1961 年に名付けたアロステリック制御は、1956 年に Umbarger により報告された代謝産物による代謝上流の酵素に対するネガティブフィードバックの発見から議論が始まった。つまり、酵素の基質となる物質以外にも酵素に対して影響を及ぼす物質が存在し、基質とは競合せず酵素蛋白質に結合し活性を制御する、そのような現象をアロステリック制御と呼んだ。本講演でもアロステリック創薬はこのような文脈で使用する。未だに蛋白質におけるアロステリック制御の実態は不明瞭である。本講演では、2 型糖尿病治療薬の標的分子として創薬研究を牽引した核内受容体 PPAR γ を題材として、structure-based drug discovery (SBDD) の光と闇を経験した私の経験を紹介するとともに、もがきながらもアロステリック制御の実態に分け入り、SKY プロットの開発を経てアロステリック創薬に光明を見つけた経緯について紹介したい。

(5) 15:10 - 15:50

「共溶媒分子動力学計算によるタンパク質構造へのプロファイリング」

広川 貴次 (筑波大学)

共溶媒分子動力学 (MD) 計算は、小分子 (プローブ) を高濃度で MD シミュレーションに加えることで、共溶媒分子がターゲット分子の表面にどのように結合するかを解析し、潜在的な結合部位を特定することに有効な手段として広く用いられている。本発表では、プローブの選定やアロステリック・クリプトサイト同定への実施例など、これまでの動向を概説し、現在、取り組んでいる共溶媒 MD シミュレーションの活用例について紹介する。

(6) 15:55 - 16:35

「量子インスパイアード最適化技術「SQBM+」を活用したアロステリック創薬」

木村 圭一 (AOI Biosciences 株式会社)

AOI Biosciences では東芝デジタルソリューションズ株式会社と共同で、量子インスパイアード最適化ソリューション「SQBM+」を活用して、タンパク質の立体構造情報からアロステリックサイトを予測する技術を開発しました。本技術を基盤とした独自のアロステリック創薬 (ABDD : Allosteric-based Drug Design) では、創薬困難とされるタンパク質 (undruggable target) に対しても新たなターゲット領域を検出し創薬を可能にします。本講演では、弊社アロステリックサイト予測技術の概要と本技術で予測したアロステリックサイトを標的とした候補化合物探索の取り組み (in silico/in vitro) について紹介します。

(7) 16:35 - 17:15 パネルディスカッション

(8) 17:15 - 17:20 まとめ

開催報告 :

本講演会では、アロステリック創薬に関連する構造予測、機能解析、評価技術など、多様な視点から先進的な研究成果が紹介されました。計算と実験、それぞれのアプローチが展開される中で、今後の創薬研究に向けた新たな可能性と広がりを感じさせる内容でした。多角的な視点に触れることで理解が深まり、大変実りある機会となりました。貴重なお話を共有いただいた講師の皆様に、心より感謝申し上げます。

※当日の参加者数 : 246 名

(世話人一同)



喜井 勲 先生



白木 琢磨 先生



広川 貴次 先生

第 465 回 CBI 学会 講演会

「最新の in vitro, 動物, in silico (PBPK) 手法による薬物動態予測の深化」

日時：2025 年 7 月 8 日（火）13:00 - 17:50

会場：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：杉山 雄一（城西国際大学 イノベーションベース）、土谷 聡耀（慶應義塾大学薬学部）

プログラム：

(1) 13:00 - 13:10 はじめに

(2) 13:10 - 13:50

「シクロスポリン (CsA) の OATP1B1 阻害に関する時間依存性 DDI (trans-inhibition) は臨床データにどのように反映されるか？—PBPK を用いた解析」

杉山 雄一（城西国際大学）

薬物相互作用の時間依存性解析は、これまで主に代謝酵素に対する mechanism-based inhibition (MBI) に焦点を当て、in vitro 試験や臨床データが蓄積されてきた。一方で、OATP1B1、OCT1 などのトランスポーターに関しても、in vitro 試験で時間依存的な阻害が報告されているが、これらの阻害メカニズムの in vivo への反映については全く検討されていない。近年の研究では、シクロスポリン (CsA) が OATP1B1 を細胞内側から阻害する「trans-inhibition」が確認されており、これは OATP1B1 のコンフォメーション変化を介した非競合的な阻害である可能性を示唆してきた。この阻害様式は、従来の競合阻害とは異なる薬物動態的特徴を有し、臨床的 DDI 予測において新たな視点を提供する。本発表は、エーザイの和泉博士、野崎博士との共同研究を介して行われたものである。

(3) 13:50 - 14:30

「血清ビリルビン値上昇の原因は薬物による肝毒性か？酵素やトランスポーターの阻害か？これらを区別するための PBPK モデル解析」

中山 慎司（田辺三菱製薬株式会社 創薬本部 薬物動態研究所）

薬物投与に伴う血清ビリルビンの上昇は、肝機能障害や肝不全の可能性を検出するための代表的な検査指標である。一方で、薬物がビリルビンの消失に関わる酵素やトランスポーターの機能を阻害することにより、肝障害がなくても血清ビリルビンが増加する場合がある。肝毒性は医薬品開発中止判断にもつながることから、血清ビリルビン値上昇の機序を定量的に解釈することは重要である。本発表では、PBPK モデル解析を活用した抗 HIV 薬の血清ビリルビン値上昇の定量的な解析に関する研究を紹介する。加えて、演者らが実施している抗 HCV 薬の解析事例についても紹介し、PBPK モデル解析の意義を議論する。

(4) 14:30 - 15:10

「胆汁成分の回収が可能な肝細胞培養系 icHep の作成と薬物動態解析への応用」

荒川 大（名古屋市立大学大学院薬学研究科）

薬物の胆汁中排泄は主要な薬物消失過程となるが、初代ヒト肝細胞を用いた評価が難しい。その理由として初代培養肝細胞では胆管が細胞間に形成され、分泌された胆汁成分を回収できないことが挙げられる。我々は密着結合タンパク質 claudin-1 をコートした培養器材を用いることで、ヒト肝細胞の胆管を培養器材側へ開口させる培養系 icHep の作成に成功した。本講演では icHep 系を用いた薬物胆汁中排泄予測や薬物代謝物の血中・胆汁移行性予測などの薬物動態解析における応用事例を紹介する。

(5) 15:30 - 16:10

「Humanized mice を用いた肝クリアランスの予測」

三宅 泰司（中外製薬株式会社 医科学薬理部）

ヒト薬物動態予測には、①ヒト細胞を用いた *in vitro* からの予測方法と②野生型動物を用いた経験則による *in vivo* からの予測方法の2種類のアプローチが従来から存在する。しかしながら、*in vitro* 系では被験化合物の物性の悪さやヒト生理学的条件の再現の限界があり、*in vivo* 系では代謝酵素やトランスポーターなどの種差があるため、より精緻なヒト予測は限界がある。そこで、我々は経験則ではない予測系として Humanized mice を用いた手法を開発している。今回は、ヒト肝細胞キメラマウスを使った肝クリアランスや薬物間相互作用の予測を紹介する。

(6) 16:10 - 16:50

「PBPK モデル解析によって非線形薬物動態のメカニズムを理解しバイオアベイラビリティを推定する方法とは？」

土谷 聡耀（慶應義塾大学薬学部）

代謝酵素やトランスポーターの飽和によって生じる非線形薬物動態を PBPK モデルでメカニズム解析する際、一般的にミカエリス定数 K_m と薬物の非結合型濃度の比較が行われる。しかし、これだけでメカニズムを結論づけることは不十分である。実際には感度分析やクリアランスの時間推移、モデルのシミュレーションから得られる消化管吸収率 (F_a)、小腸アベイラビリティ (F_g)、肝アベイラビリティ (F_h) を総合的に評価する必要がある。また $F_a F_g F_h$ の積から、非線形条件下におけるバイオアベイラビリティを概算することができ、非線形薬物動態への理解を深めることが可能となる。

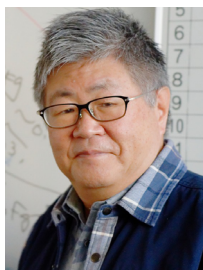
(7) 16:50 - 17:50 総合討論

開催報告：

今回の講演会では薬物動態研究と予測に関係する幅広い解析手法を取り扱う研究者が集い、多角的なテーマを取り扱うことができた。特に荒川先生の icHep 細胞は現在薬物動態予測で抱えている胆汁排泄の定量的な評価において大きなブレイクスルーとなることが期待される。また humanized mouse を用いた肝クリアランスや薬物間相互作用の予測も精度が高く、*in vitro* の課題を乗り越える貴重なツールである。総合討論では、今後どの程度エビデンスとして使えるか、規制当局との関わり方などについても質問があり、活発な議論が交わされた。

※当日の参加者数：175 名

(世話人一同)



杉山 雄一 先生



中山 慎司 先生



荒川 大 先生



三宅 泰司 先生



土谷 聡耀 先生

第 466 回 CBI 学会 講演会

「多様なモダリティを志向した分子シミュレーションと実験的アプローチ」

日時：2025 年 8 月 8 日（金）13:00 - 16:50

会場：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：門 祐示 (Meiji Seika ファルマ株式会社)、田村 勇之進 (株式会社 Preferred Networks)、
緑川 淳 (株式会社ワールドフュージョン)、森本 幸恵 (武田薬品工業株式会社)

プログラム：

(1) 13:00 - 13:05 開会の挨拶

(2) 13:05 - 13:35

「超巨大ケミカルスペースを効率的に探索する次世代バーチャルスクリーニング」

神谷 謙太郎 (株式会社モルシス)

理論的に存在し得るすべての化合物の集合（ケミカルスペース）は、低分子に限定しても 10^{60} 規模に達する。近年の計算技術の発展に伴い、億単位のケミカルスペースからのバーチャルスクリーニングが可能になってきているが、従来の方法では、超巨大ケミカルスペースを探索するには膨大な計算資源が必要である。独 BioSolveIT 社は、化学反応とビルディングブロックに基づくコンビナトリアル空間を活用することで、膨大な計算資源を使わずに数百億以上の規模のケミカルスペースを効率的に探索できる製品（infiniSee、SeeSAR）を開発した。infiniSee は 2D ベースの高速スクリーニング、SeeSAR の Chemical Space Docking™ はドッキング計算による 3D ベースのスクリーニングが可能である。本発表では、これらの製品による超巨大ケミカルスペースを効率的に探索する次世代創薬支援技術を紹介する。

(3) 13:35 - 14:05

「クラウドプラットフォーム Orion® で行う SBDD のリード最適化手法について」

近田 千春 (OpenEye, Cadence Molecular Sciences)

リード最適化では、骨格への置換基導入により非常に多くの候補化合物を生成するサイクルが発生します。段階的な選別を繰り返す中で、薬になる可能性の高い候補を残し、そして最終的にはこれらの候補のごく一部のみを合成し評価します。そのため、計算手法を用いてこのプロセスをサポートする際に考慮すべきことは、（１）候補化合物が合成可能であること、（２）計算が高速に終わること、計算費用が安価であること、（３）操作が簡単であること、が挙げられます。この講演では、Orion に搭載されているライブラリー生成機能から始まり、相対結合自由エネルギー計算に至るリード最適化の一連のサイクルを、この３つの観点からご説明します。



(4) 14:05 - 14:35

「計算法学技術を最大限活用した新たな低分子創薬のパラダイム」

高岡 雄司（シュレーディンガー株式会社）

低分子創薬においてリガンド-受容体間の相互作用の強さを精確に見積もることは、研究を効率的に進めるために重要であり、必要とされるスループットと精度に応じて様々な計算法学的手法が提案されてきました。特に近年は扱う化合物空間が桁違いに大きくなっており、速度と精度という、相反する要求を満たせるようなワークフローが求められています。弊社ではこれまで上記要求を満たすための様々な要素技術を開発してきており、製薬企業との共同研究や社内の創薬事業において、これらを組み合わせたワークフローの有用性を示してきました。しかしながら実際に短期間で候補化合物を見つけるためにはかなりの数のライセンスと膨大な計算資源を必要とし、日本の多くの製薬企業にとっては適用が難しいものとなっていました。そこで我々は、これら実証済みのワークフローを比較的手軽に活用できるよう、定額で利用できる有償サービスを展開しています。これらには市販化合物からのバーチャル・スクリーニング、リード化合物の最適化や ADMET 予測などが含まれており、弊社が持つ計算法学技術やノウハウを最大限活用して定額、短期間で成果を得ることができます。さらに知識移転を促進するプロセスによって、その後弊社のソフトウェアを有効に活用するための経験値も取得できるようになっています。本講演においては、これらの受託サービスの内容や事例についてご紹介させていただきます。

(5) 14:45 - 15:25

「標的タンパク質分解薬の創製研究」

石川 稔（東北大学大学院生命科学研究科）

PROTAC (proteolysis targeting chimera) は、ユビキチンリガーゼのリガンドと標的タンパク質リガンドをリンカーを介して連結した分子であり、両タンパク質を強制的に近接させることによって、標的タンパク質のユビキチン化・プロテアソーム分解を誘導する。また、タンパク質分解を司る他タンパク質と、標的タンパク質を強制的に近接させる標的タンパク質分解技術 (targeted protein degradation, TPD) も開発されており、新しい創薬手法として注目されている。本発表では、これまで行ってきた PROTAC などの TPD 研究を紹介したい。そして、TPD 研究におけるシミュレーションの活用についてご議論頂きたい。

(6) 15:25 - 16:05

「分子シミュレーションと細胞分子ディスプレイによる抗体代替ペプチドの開発」

門之園 哲哉（東京科学大学生命理工学院）

抗原に特異的かつ強力に結合するペプチドは、安定性、組織浸透効率、体外排出効率が高く、新たな創薬モダリティとしての利用が期待されている。我々はこれまでに、抗体の相補性決定領域の抗原結合ペプチドを足場ペプチドに組み込んで構造ゆらぎを抑制することにより、抗体代替ペプチド (FLuctuation-regulated Affinity Peptide, FLAP) を創出できることを示してきた。本講演では、FLAP の開発事例を紹介するとともに、細胞分子ディスプレイと機械学習を組み合わせた FLAP の高性能化技術の現状について紹介する。

(7) 16:05 - 16:45

「分子シミュレーションを基盤としたアプタマー・核酸創薬への取り組み」

山岸 賢司（日本大学工学部生命応用化学科）

核酸医薬品はタンパク質の発現を遺伝子レベルで制御することにより、低分子医薬品や抗体医薬では治療が困難な疾患に対して、治療の可能性をもたらす新たな創薬モダリティとして期待されている。本発表では、主に核酸アプタマーに対する分子シミュレーション解析の実例を中心に、私たちが取り組んでいる分子シミュレーション解析を基盤とした核酸創薬の取り組みについて紹介する。

(8) 16:45 - 16:50 閉会の挨拶

開催報告：

本講演会では前半にベンダー 3 社より、低分子創薬への様々なアプローチを紹介いただいた。巨大な化合物ライブラリの活用、クラウド環境でのリード最適化、自由エネルギー計算サービスなど、いずれも高速で適用範囲が広く、高い予測性能を誇るツールが紹介された。

後半はアカデミアの先生方から、主に PROTAC による標的タンパク質分解技術、構造揺らぎを抑えた抗体代替ペプチドのスマートデザイン、核酸アプタマーやアンチセンスの分子シミュレーションに関する講演が行われた。

幅広い創薬モダリティについて、計算科学を活用した新しい分子設計と実験的手法の双方の視点から、実例を交え最新動向を紹介いただく機会となった。

ご講演いただいた講師の先生方、ご参加いただいた皆様、そしてご支援いただいた全ての関係者の皆様に改めて御礼申し上げたい。

※当日の参加者数：212 名

(世話人一同)



近田 千春 先生



高岡 雄司 先生



石川 稔 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 467 回 CBI 学会講演会

「ウイルス感染症研究の最前線 ～ CBI 学会へのメッセージ～」

日程：2025 年 9 月 12 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：福澤 薫（大阪大学）、田中 成典（神戸大学）、西村 有平（三重大学）

第 468 回 CBI 学会講演会

「オープンサイエンスが変える研究のかたち ～共創の力と課題～」

日程：2025 年 11 月 28 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：高橋 一敏（味の素株式会社）、新井 浩一郎（旭化成ファーマ株式会社）

大川 和史（塩野義製薬株式会社）、芹沢 貴之（第一三共株式会社）

宮野 奈津美（帝人ファーマ株式会社）



委員会開催報告

創薬研究会運営委員会

第 70 回 創薬研究会運営委員会

日時：2025 年 7 月 16 日 (水) 10:00 - 12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

執行部会

第 115 回 執行部会

日時：2025 年 6 月 24 日 (火) 17:30 -

場所：CBI 学会事務局 (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)

Zoom 会議

第 116 回 執行部会

日時：2025 年 7 月 22 日 (火) 18:00 - 18:30

場所：CBI 学会事務局 (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)

Zoom 会議

第 117 回 執行部会

日時：2025 年 8 月 28 日 (木) 18:00 - 19:00

場所：CBI 学会事務局 (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)

Zoom 会議

CBI ジャーナル編集委員会

分野長会議 第一回

日時：2025 年 8 月 18 日 (月) 9:00 - 10:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

CBI 学会誌編集委員会

2025 年第 3 回 編集委員会

日時：2025 年 7 月 18 日 (金) 14:00 - 15:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

CBI 研究機構

第 51 回 運営会議

日時 : 2025 年 6 月 26 日 (木) 9 : 00-10 : 00

場所 : Zoom ミーティングによる遠隔会議

第 52 回 運営会議

日時 : 2025 年 7 月 18 日 (金) 13:00 - 14:00

場所 : Zoom ミーティングによる遠隔会議

2025 年大会実行委員会

第 6 回 実行委員会

日時 : 2025 年 6 月 17 日 (火) 14:00 - 15:00

場所 : Zoom ミーティングによる遠隔会議

第 7 回 実行委員会

日時 : 2025 年 7 月 15 日 (火) 14:00 - 15:00

場所 : Zoom ミーティングによる遠隔会議

2025 年大会プログラム委員会

第 6 回 プログラム委員会

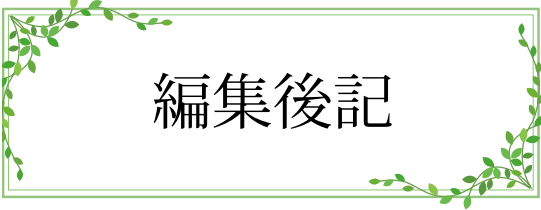
日時 : 2025 年 6 月 17 日 (火) 15:00 - 16:00

場所 : Zoom ミーティングによる遠隔会議

第 7 回 プログラム委員会

日時 : 2025 年 7 月 15 日 (火) 15:00 - 16:00

場所 : Zoom ミーティングによる遠隔会議



編集後記

今後どうなるのだろうか、と日々感じているのが、AI と異常気象。地球温暖化は人類の活動の結果とされており、事は人間次第といったところなのでしょうか。AI 災害などという言葉が使われることがないようにと願っています。

さて、本号（第 13 巻、第 3 号）の巻頭言には、CBI 研究機構次世代モダリティ研究所）の坂田恒昭先生による、オープンイノベーションに必要な人材についてのお考えなどが述べられています。

ホットトピックスでは、「制御因子を見抜く AI：細胞状態を読み解く新手法」を、Xingran Wang 先生、Zi Wang 先生のお二人により寄稿して頂きました。詳細な内容です。CBI ジャーナル便り：著者が紹介する CBIJ 掲載論文では、Morgan Fingerprint を使った代謝に寄与する部分構造の可視化について、ファーストオーサーの江崎剛史先生より解説を頂きました。

紹介のコラムでは、2024 年 CBI 大会フォーカストセッションにおける計算科学業界のキャリアチェンジに関するアンケート結果が、CBI 若手の会より詳しく紹介されています。

最後に、CBI 若手の会コラムとして、若手の会キャリア（第 11 回）「私のキャリアパス紹介」を鎌田真由美先生に執筆頂きました。その他常設の、講演会 報告・予告、委員会開催報告も併せてご参照ください。

ご寄稿頂きました皆様を始め、多くの方々のご協力により、本号の発刊となりました。ここに御礼申し上げます。（T. M.）

CBI 学会誌 第 13 巻 第 3 号

2025 年 9 月 1 日発刊

CBI 学会誌編集委員会：

編集委員長	水間 俊	（帝京平成大学薬学部）
副編集委員長	高岡 雄司	（シュレーディングー株式会社）
編集委員	江崎 剛史	（滋賀大学）
	熊澤 啓子	（帝人ファーマ株式会社）
	高橋 一敏	（味の素株式会社）
	朴 鐘旭	（株式会社明治／医薬基盤・健康・栄養研究所）
	渡邊 博文	（株式会社ウィズメーティス）
	渡邊 怜子	（大阪大学蛋白質研究所）
	大曽根 達則	（岡山大学学術研究院医歯薬学域）

制作：塩塚 真理、牛尾 律子、岸 早絵、高澤 恵、小宮山 直美、藤田 真澄

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。

