10月26日（火）

Zoom ブレイクアウトルーム

＜ランチタイムセミナー＞

LS-01　オープンアイ・ジャパン株式会社.....1
M. Frank Erasmus（Head of Bioinformatics, Specifica, Inc.）
"Cloud-Based Discovery Platform Identifies Hundreds of Diverse SARS-CoV-2 Antibodies"

＜スポンサーセッション＞

SS-01　株式会社ジー・サーチ.....3
『ゲノム医療・創薬分野におけるAI/自然言語解析を用いた論文調査の効率化』
森田 一（富士通㈱）
「ゲノム医療の文献・データベース調査を効率化する人工知能技術」
井上 和仁（㈱ジー・サーチ）
「医療分野における論文調査を効率化するサービス「JDream SR」」
北島 正人（富士通㈱）
「JDream SRによるゲノム医療・創薬向けの文献検索の活用イメージ」
SS-02　新世代中性子構造生物学研究会.....5
『+N（中性子との連携解析）により拡がる研究世界』
モデレーター：杉山 正明（京都大学）、
玉田 太郎（量子科学技術研究開発機構）
芝口 友隆（慶応義塾大学）
「MD シミュレーションと溶液散乱実験による蛋白質構造揺らぎの可視化: ベイズ学習の適用に向けて」
木下 誉富 （大阪府立大学）
「中性子線結晶構造解析と MD シミュレーションを駆使した酵素反応の理解」
中川 洋（日本原子力研究開発機構）
「中性子準弾性散乱と分子シミュレーションによる蛋白質のドメイン運動の解析」

SS-03 **株式会社モルシス**.....7
『低分子創薬を加速させるメドケムソフトウェアの紹介』
池上 貴史（㈱モルシス）
「ケミカルスペース高速探索ツール infiniSee**」**
阿部 紘一（㈱モルシス）
「SAR/MMP解析ウェブアプリケーション MOEsaic**」**
篠崎 康裕（㈱モルシス）
「創薬研究情報共有クラウドシステム CDD Vault**」**
SS-04 **ブルカージャパン株式会社**.....9
【新製品】生物学者向け描画ツール『Arxspan BioDrive**ご紹介』**
瀧田 雅樹（ブルカージャパン㈱）
北野 健太（富士通㈱）
SS-05 **ジュビラント バイオシス リミテッド**.....11
『AI創薬に付加価値を加える』
Jeyaraj D.A（**ジュビラント バイオシス リミテッド**）
「インシリコ手法による、ヒット最適化のための応用事例紹介」
Takeshi Yura（**ジュビラント バイオシス リミテッド**）
「AI補助による、新規ターゲットの同定」
Ravi Kumar Trivedi（**ジュビラント バイオシス リミテッド**）
「DMPK の観点から見た、化合物のデザインと最適化」
SS-06 **ドットマティクス株式会社**.....13
『ドットマティクスが提供するAI/MLプロトタイプとCerevel Therapeutics社の事例』
福山 隆（ドットマティクス㈱）
Hanh Nho Nguyen（Cerevel Therapeutics）
SS-07 **ライフマティックス株式会社**.....15
『Cresset**社** Flare™ **による分子デザインと結合自由エネルギー（**FEP**）計算の最新動向』**
原 隆一郎（Cresset**）**
「Flare™V5: SBDD+LBDD **による分子デザイン ― 結合自由エネルギー、ダイナミクス、**QSAR**」**
大上 雅史（東京工業大学）
「TSUBAME 3.0 **による** Cresset Flare FEP **計算の展開」**

SS-11 **株式会社Elix**.....17
Casey Galvin（㈱Elix）
"Building an AI Drug Discovery Platform at Elix, Inc."
Nazim Medzhidov（㈱Elix）
"Target Discovery in the age of Big Data and AI"
Jun Jin Choong（㈱Elix）
"Towards Generating Synthesizable de novo small Molecules"
SS-12 **日本蛋白質構造データバンク/ケンブリッジ結晶学データセンター**...19
栗栖 源嗣（大阪大学蛋白質研究所）
「コロナ禍における PDB の活動と構造データの品質向上およびデータ検証の取り組みについて」
中川 敦史（大阪大学蛋白質研究所）
「wwPDBがデータ検証で用いるCSDを活用した BUSTERによる構造精密化事例について」
Francis L. Atkinson（Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)）
"Data integration to facilitate drug discovery"
SS-13 **アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社**.....21
『新薬創出におけるクラウド活用の取り組み』
原田 裕平（アマゾン ウェブ サービス ジャパン㈱）
「AWSで実現する研究者のための創薬研究基盤」
荒川 晶彦、角崎 太郎、西藤 ゆかり（中外製薬㈱）
「中外製薬の創薬研究におけるAWS活用事例紹介」
SS-14 **株式会社ワールドフュージョン**.....23
『MoAデータの活用と、意思決定ツールによる創薬の加速』
緑川 淳（㈱ワールドフュージョン）
「LSKB 新機能のご紹介 ～AI学習で作成した MoA データと意思決定支援ツールの導入」
黒野 昌邦（小野薬品工業㈱）
「ユーザーフレンドリーな新規可視化法「エルピスマップ」によるリード創製への見極め －ビッグデータ解析のアンバイアスドメソッドによる「俯瞰・予測・判断」の提案－」
緑川 淳（㈱ワールドフュージョン）
「BERTによる新しいMoA抽出と読解エンジンとしての活用の可能性」
Jordi Mestres（Chemotargets S.L.,）
”Clarity PV: from Safety Pharmacology to Post-marketing Surveillance”

SS-15 **インフォコム株式会社** 25
『KNIME機械学習自動化パッケージのご紹介』
SS-16 Schrödinger 27
『生体分子相互作用の理解と次世代抗体工学』
津本 浩平（東京大学）
「抗体の抗原特異性創出機構の解明と親和性向上指針の提案」
市原 収（シュレーディンガー㈱）
"Schrödinger's approach to physics-based antibody analysis and design: modeling of antigen-antibody complexes with disordered epitopes"
SS-17 **シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社** 29
『SYNTHIA™ 逆合成解析ソフトウェアのご紹介』
Dong-Hwi Kim（Merck KGaA）
田中 紀子（シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社）

＜フォーカストセッション＞
FS-01 **生命の起源：意識の起源に向けて** 30
モデレーター：田中 成典（神戸大学）
講師：
山田 真希子（量子科学技術研究開発機構）
「クオリア構造の脳活動」
大泉 匡史（東京大学大学院総合文化研究科）
「クオリア構造の定量化に基づく意識の理論の検証」
FS-02 **医療データAI解析実践フォーラム** 31
モデレーター：水野 聖士（東北大学）、小島 諒介（京都大学）、荻島 創一（東北大学）
講師：
小島 諒介（京都大学）
「グラフニューラルネットワークを用いた医療関連データ処理」
水野 聖士（東北大学）
「大規模コホートデータを使用した早期疾患予測モデルの検討」
松田 孟留（理化学研究所）
「データ駆動型研究のためのモデリング・アルゴリズム・数理」
佐藤 淳平（東京大学）
「地域のレセプト情報に基づく介護需要の将来推定」

FS-03　創薬の加速化を目指したインシリコ予測
～若手研究者が拓く新時代～.....32

モデレーター：曽根 秀子（横浜薬科大学）、渡邉 怜子（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）

講師：

渡邉 怜子（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）

「P-glycoprotein輸送能を考慮した中枢移行性予測」

黒崎 宏太、植沢 芳広（明治薬科大学 医療分子解析学研究室）

「生物学的メカニズムに基づいた薬剤性肝がん誘発薬物予測モデルの構築と評価」

江崎 剛史（滋賀大学）

「Mproの阻害予測を目指した構造記述子の検討と課題」

LS-01
日時：10月26日（火）12:00-13:00

Cloud-Based Discovery Platform Identifies Hundreds of Diverse SARS-CoV-2 Antibodies

M. Frank Erasmus[1]
ferasmus@specficia.bio

[1] Specifica, Inc. 1607 Alcaldesa St., Santa Fe, New Mexico 87501, USA.

Keywords: Antibody engineering, Antibody discovery, Next generation sequencing, Therapeutic antibodies, Drug discovery, In-vitro (phage and yeast) display, Bioinformatics, Immunoinformatics

Therapeutic antibodies, used to treat a variety of diseases, are the fastest growing class of pharmaceuticals projected to grow to ~$240 billion by 2025[1]. Isolation of individual antibodies for biophysical screening can been performed by a variety of technologies ranging from animal immunization[2], advanced methods harnessing the immune response[3-5] and *in vitro* display technologies[6-8]. In most, if not all, of these cases, antibody engineers must sequence the outputs, using low- (e.g., Sanger) and/or high-throughput (e.g., next generation sequencing (NGS)) to gain a deeper understanding of critical features including scaffold distribution, complementarity determining region (CDR) composition, physicochemical similarity, sequence and/or structure-based biophysical properties, and population-based NGS metrics. At Specifica, we routinely combine Sanger and NGS to broaden the scope of selected antibody diversity for characterization. The goal is to minimize redundancy and maximize epitope coverage by selecting antibody representatives from distinct CDR classes. To achieve this, Specifica built a comprehensive bioinformatics software package readily suited for the identification of therapeutic leads from next generation sequencing (NGS), which even allows for the efficient ranking of low-throughput clones identified by random picking. After teaming up with OpenEye Scientific, we have integrated this antibody discovery pipeline into Orion™ to empower the antibody engineering community with a cloud-based solution for the efficient identification of therapeutic candidates for screening. This talk describes how we used this discovery software to identify a panel of leads with broad specificity, including many highly potent neutralizers against SARS-CoV-2 Spike protein.

[1] https://apnews.com/press-release/pr-businesswire/af15cf4cf54e4698a93689afb4a906e8
[2] Prabakaran, P., Rao, S., & Wendt, M. Animal immunization merges with innovative technologies: A new paradigm shift in antibody discovery. *mAbs*. **2021**. 13. 1.
[3] Love, J.C., *et al.* A microengraving method for rapid selection of single cells producing antigen-specific antibodies. *Nat. Biotech*. **2006**. 24. 703-707.
[4] Jin, A. *et al.* A rapid and efficient single-cell manipulation method for screening antigen-specific antibody-secreting cells from human peripheral blood. *Nat. Med.* **2009.** 15. 1088-1092.
[5] Reddy, S.T. *et al.* Monoclonal antibodies isolated without screening by analyzing the variable-gene repertoires of plasma cells. *Nat. Biotechnol.* **2010**. 28. 965-969.
[6] Larrick, J.W. *et al.* Rapid cloning of rearranged immunoglobulin genes fromo human hybridoma cells using mixed primers and the polymerase chain reaction. *Biochem. Bioophys Rs. Commun.* **1989**. 160. 1250-1256.
[7] Marks, J.D. *et al.* by-passing immunization. Human antibodies from V-gene libraries displayed on phage. *J. Mol. Biol.* **1991**. 222. 581-597.
[8] Boder, E.T. & Wittrup, K.D. Yeast surface display for screening combinatorial polypeptide libraries. *Nat. Biotechnology*. **1997**. 15. 553-557.

About Specifica

Specifica is headquartered in Santa Fe, New Mexico, and provides antibody discovery services to the pharmaceutical and biotech industries. Specifica's flagship technology, the Generation 3 Antibody Discovery Platform, is centered around a suite of novel patented in vitro phage and yeast display library technologies which consistently yield antibodies with broad diversities, extremely high affinities, and the relative absence of biophysical liabilities. The Generation 3 platform may be accessed by engaging Specifica to carry out antibody discovery or optimization campaigns, or by full transfer of the platform within an end-to end matrix that includes the critical tools required to generate a broad set of drug-like antibody leads that require minimal optimization. Libraries can be based on Specifica's in-house design or customized to suit customer preferences. As part of its in-house antibody discovery services, Specifica developed AbXtract, a modular bioinformatic platform designed to easily analyze next generation sequencing antibody datasets to facilitate lead selection. This platform is now being co-marketed with OpenEye for broader access to the biotech and pharma community.

About OpenEye

OpenEye Scientific is an industry leader in computational molecular design through rapid, robust, and scalable software, consulting services, and Orion®, the only cloud-native fully integrated software-as-a-service molecular modeling platform. Combining unlimited computation and storage with powerful tools for data sharing, visualization and analysis in a flexible development platform, Orion offers unprecedented capabilities for the advancement of pharmaceuticals, biologics, agrochemicals, and flavors and fragrances. Founded in 1997, OpenEye is a privately held company headquartered in Santa Fe, N.M., with offices in Boston, Mass.; Cologne, Germany; and Tokyo, Japan. For more information, go to www.openeye.inc.

About Orion

Orion® delivers the OpenEye computational tools scientists have trusted for more than twenty years in an integrated web platform.

- Run ligand-based or structure-based virtual screenings, molecular dynamics (MD) simulations, free energy predictions, quantum mechanics calculations, and more from just a web browser.
- Integrate third-party or in-house tools.
- Collaborate with colleagues without file transfers and formatting.
- Leverage pre-built workflows or customize your own.

CBI 学会 2021 年大会　スポンサーセッション SS-01

ゲノム医療・創薬分野における
ＡＩ/自然言語解析を用いた論文調査の効率化

株式会社　ジー・サーチ

2021 年 10 月 26 日 (火) 13:00 - 14:30

弊社株式会社ジー・サーチは、医療分野における文献調査を AI 技術の導入により大幅に効率化する「JDream SR（ジェイドリーム エスアール）」のサービス提供を昨年 12 月より開始いたしました。本セッションでは、「JDream SR」サービスの概要、技術基盤及び実用イメージについて紹介させていただきます。

ゲノム医療の文献・データベース調査を効率化する人工知能技術
森田 一　（富士通株式会社）

個別化医療における治療方針の決定には論文やデータベースから情報の収集・解釈が必要となる。手作業で文献やデータベースを調査する負担は大きく、短い時間で効率的に情報の収集・解釈を行うため、人工知能技術をどう活用するかが課題となっている。ここでは、二つの人工知能技術について紹介する。一つ目は、文献を自動的に解析することで意味的な検索機能を提供し、文献調査を補助する自然言語処理の技術。二つ目は、データベース等に記載がない VUS の解釈を補助するため、臨床的意義を推定し、その根拠を提示する技術である。

医療分野における論文調査を効率化するサービス「JDream SR」
井上 和仁　（株式会社ジー・サーチ）

JDream SR は AI を活用し、膨大な医学薬学論文から、重要用語（疾患、薬剤、遺伝子、アウトカム指標など）や重要エビデンスを抽出することで、様々な機能を実現している。今回は JDream SR の既存機能と今年リリース予定の機能について、紹介する。その中でも特に、論文検索結果の全体像を俯瞰的に把握する集計機能を紹介する。
サービスの詳細は下記サイトをご覧ください。
https://jdream3.com/lp/jdream_sr/

JDream SR によるゲノム医療・創薬向けの文献検索の活用イメージ
北島 正人　（富士通株式会社）

ゲノム医療において、診断、予後予測、治療や研究を行う（例えば、ある遺伝子異常に対する医薬品の効果など）上で、過去の事例やエビデンス情報などについて、論文を調査するケースがある。これらの論文調査を行うにおいて、JDream SR を活用することで、目的の論文を効率よく検索し、エビデンスなどの詳細情報や関連情報などを簡便に確認することができる。本発表では、新機能としての集計機能などを活用して、ゲノム医療・創薬向けのユースケースを想定して、JDream SR の活用イメージについて紹介する。

JDream SR

「がんゲノム医療」分野の文献調査をAIがアシスト

AI を活用した目的特化型検索サービス JDream SR は、遺伝子名・変異名・疾患名・医薬品名等の医療用語と、それらの関係性を用いた効率的な論文検索により、がんゲノム医療分野の文献調査を効率化します。

サービスページはこちら

見つける

AI が論文ビッグデータを解析し、目的・疾患と医薬品などの関係性を反映して抽出。欲しい論文に速やかにたどり着けます。

把握する

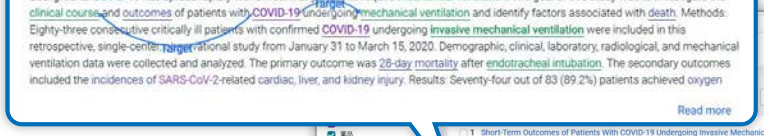
富士通の独自技術によって、高度な専門分野の情報解析を実現。医薬品と遺伝子変異の関係性やアウトカムを容易に把握できます。

調査時間削減

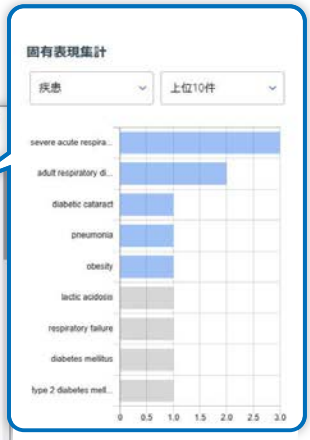
医療分野に特化した形式で結果を確認できるため、これまでの文献調査に比べ時間を大幅に短縮できます。

医療分野に特化したサービスならではの使いやすさ

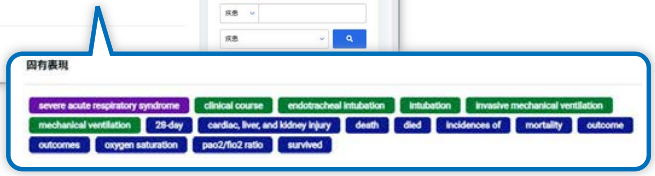
疾患と治療法、疾患と遺伝子など関係性の指定、矢印によるリンク表示



自動集計機能



図表の抽出



疾患・アウトカム指標など種類ごとの重要表現抽出

ゲノム医療におけるキュレーションを支援

「この遺伝子変異がある場合に有効な医薬品を探す」、「ある疾患に対して病原性を示す遺伝子変異を調査する」など、関係性を用いた効率的な文献検索により、ゲノム医療に欠かせないキュレーション業務を支援します。

【お問い合わせ】
株式会社 ジー・サーチ
Email：gsh-jd-help@cs.jp.fujitsu.com
お問い合わせフォーム：https://jdream3.com/inquiry/inquiry_entry.php

FUJITSU ジー・サーチ

2021 年 7 月

SS-02

日時: 10 月 26 日(火) 13:00-14:30

+*N*(中性子との連携解析)により拡がる研究世界
Research world pioneered by cooperative analysis with neutron

開催趣旨: 近年、構造生物学においてはさまざまな手法を組み合わせて原子レベルの分解能を得てさらに生体高分子における化学反応機序からドメインダイナミクスまで、サブナノからサブマイクロメータースケールの構造・ピコからマイクロ秒に至る時間スケールの運動の解明が始まっている。本シンポジウムでは、このような「統合構造生物学」の流れの中に意外と知られていない中性子の散乱・回折技術を加えること(＋*N*)で、更に見えてくる世界を概観し、＋*N*の将来の可能性を皆さんと議論したいと思っています。特に講演者の方にはこの分野で活発に活動している先生をお呼びし、最新の散乱回折技術と計算機を用いた統合的解析の実例を紹介して頂きます。

モデレーター:杉山 正明 Masaaki Sugiyama
京都大学 Kyoto University

玉田 太郎 Taro Tamada
量子科学技術研究開発機構
National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

1. **タイトル:MD シミュレーションと溶液散乱実験による蛋白質構造揺らぎの可視化: ベイズ学習の適用に向けて**
苣口友隆 Tomotaka Oroguchi
慶応義塾大学 Keio University
蛋白質の機能発揮メカニズムを理解するためには、溶液環境における蛋白質の構造揺らぎを可視化することが重要である。私達はこれまで MD シミュレーションと、X 線や中性子といった量子ビームによる溶液散乱実験を組み合わせることによって、蛋白質の構造揺らぎを可視化してきた(MD-SANXS 法)。現在、複数ドメイン蛋白質や天然変性蛋白質など複雑な構造変化を行う蛋白質に関しても構造揺らぎを可視化できるように、ベイズ学習の枠組みを用いて MD-SANXS 法を発展させているところであり、本発表ではそれらについて報告したい。

2. **タイトル:中性子線結晶構造解析と MD シミュレーションを駆使した酵素反応の理解**
木下誉富 Takayoshi Kinoshita
大阪府立大学 Osaka Prefecture University
X 線結晶構造解析に加えて中性子線結晶構造解析を行うと、医薬品設計や酵素反応を理解するうえで重要な水素原子の位置をたやすく決定することができる。一方で、結晶構造解析は静止画像を見ており、酵素反応の神髄ともいえる分子の動きを理解することには向いていない。そこで、結晶構造解析に加えて MD シミュレーションを行うことで酵素反応機構をより正しく理解できるのではないかと考えた。本講演では我々が取り組んでいるエラスターゼについての研究を紹介する。

3. **タイトル:中性子準弾性散乱と分子シミュレーションによる蛋白質のドメイン運動の解析**
中川洋 Hiroshi Nakagawa
日本原子力研究開発機構
蛋白質のドメイン運動は、基質との相互作用メカニズムに重要であり、そのような蛋白質ダイナミクスの解析手法は基礎研究だけでなく創薬研究にも必須である。中性子準弾性散乱は分子ダイナミクスの解析に有効であり、この手法で得られる分子ダイナミクスの時空間スケールは分子シミュレーションと重なるため、両者の手法を融合した蛋白質ダイナミクスの解析は有効である。本講演では、中性子と分子シミュレーションを用いた蛋白質のドメイン運動の研究を紹介する。

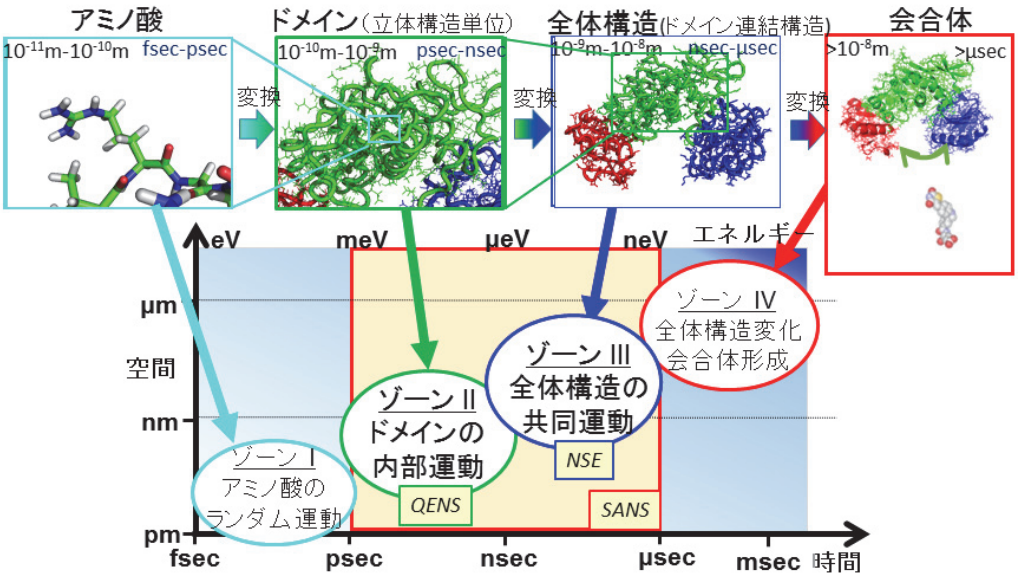
Sponsored by

新世代中性子構造生物学研究会
Neutron Structural Biology for Next Generation

本研究会では、最新の中性子分光器を利用し、生命機能に直結した蛋白質の構造変化やダイナミクスの解明を主題とした「新世代の中性子構造生物学」の開拓を目指しています。そのために、「開発研究」と「実証研究」を軸に研究を進め、構造生物学の目標である「立体構造に基づく蛋白質機能の予測・改変」の実現に繋げることを考えております。

具体的には、開発研究では生命科学におけるミッシングゾーンであったメゾスケールの時空間領域（下図の白領域）での構造・ダイナミクスを解明するための新たな中性子計測技術を基軸に計算科学や関連する測定手法を統合した解析プロトコルを確立・標準化します。

また、実証研究では上記プロトコルを用いて「時空間階層性を持つ蛋白質の各階層の構造揺らぎや階層間の連携関係」を解析し、生理的条件下での無秩序な分子振動を分子集団の秩序的な共同運動に変換する機構の探求を行っています。



http://www.rri.kyoto-u.ac.jp/NSBNG/home.html

情報計算化学生物学会 2021 年大会　スポンサーセッション

低分子創薬を加速させるメドケムソフトウェアの紹介

＜スポンサーセッション＞SS-03　10 月 26 日（火）13：00－14：30

抗体、ペプチド、核酸等の医薬品開発の多様化と共に、低分子医薬品の開発も加速しています。低分子創薬をさらに加速化させるために、ソフトウェアの新しい活用法が期待されています。本セッションでは、リード化合物探索、リード最適化、データ共有による効率化の観点から、メディシナルケミストが、簡単にアクセスでき、目的の結果を即座に得ることが可能なソフトウェアを紹介します。

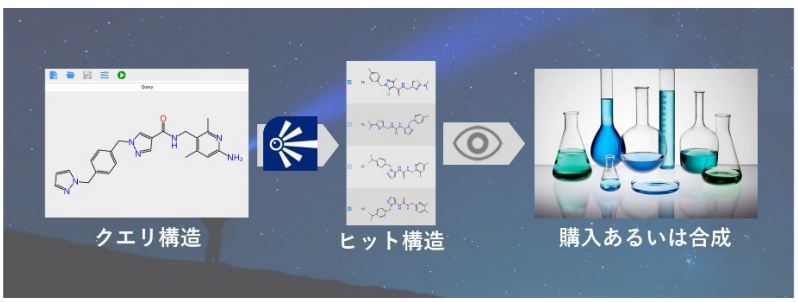
「ケミカルスペース高速探索ツール infiniSee」　池上貴史（株式会社モルシス）

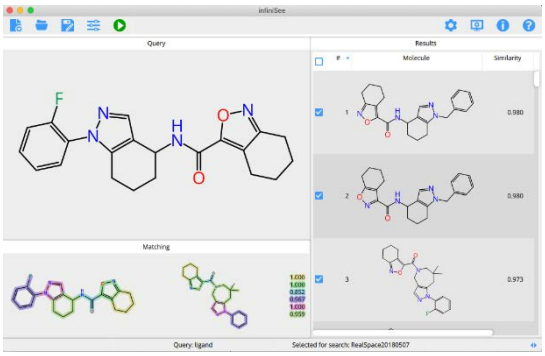
infiniSee は、無限に近いサイズの化合物空間（ケミカルスペース）の中から目的分子を高速に探索することができます。クエリー分子あるいはテンプレート構造を指定して、バーチャル化合物群から形成されるケミカルスペースあるいは既存の化合物ライブラリーの中より、化学的特徴の一致する分子構造を出力します。infiniSee は以下のような機能を有しています。

- 巨大なケミカルスペースからの超高速検索
- Scaffold Hopping された興味深い化合物の探索
- 既存のフィンガープリントによる類似性は低いが化学的に関連する化合物の発見
- 合成可能あるいは購入可能な構造の提案

品質の高いビルディングブロックと化学反応ルールからケミカルスペースは成り立ちます。Enamine 社の REAL Space (200 億分子)、WuXi LabNetwork 社の GalaXi（20 億分子）、OTAVA Chemicals 社の CHEMriya（110 億分子）から購入可能な化合物を検索でき、BioSolveIT 社の KnowledgeSpace（数千億分子）から合成可能な化合物を検索できます。CoLibri を使用することで、独自のケミカルスペースを構築可能です。

infiniSee は、新規構造、SAR 展開、特許を回避した構造などを簡単な操作で即座に発見でき、創薬研究を加速させます。





株式会社モルシス ライフサイエンス部
TEL: 03-3553-8030 E-mail: sales@molsis.co.jp
https://www.molsis.co.jp/

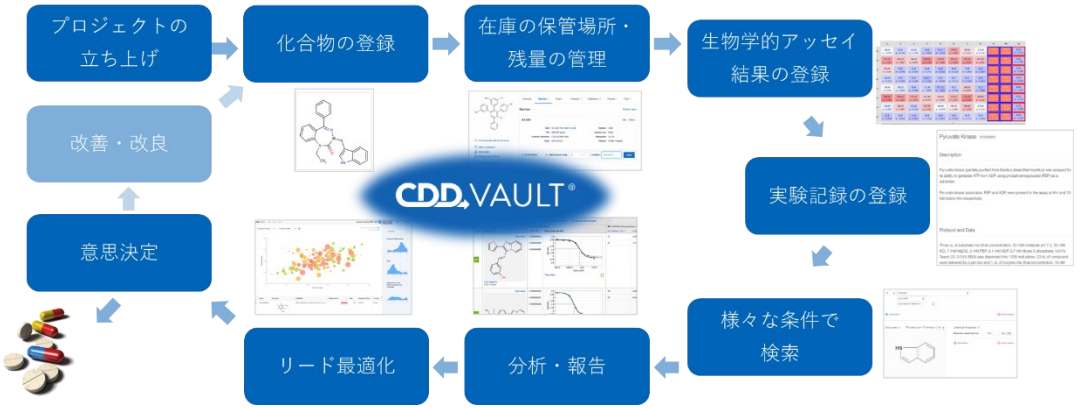
「SAR/MMP 解析ウェブアプリケーション MOEsaic」阿部紘一（株式会社モルシス）

新規化合物の設計には、目的とする薬理活性向上の他に、様々な物性や薬物動態などのパラメータを最適化する必要があります。MOEsaic は、統合計算化学システム MOE に搭載されているウェブベースのアプリケーションであり、化合物データセットの整理、化合物の探索、構造活性相関 (SAR) 解析、新規化合物の設計を簡単な操作で実行できます。具体的には、化合物の構造検索/アラインメント、Matched Molecular Pair (MMP) 解析、R-group 解析、物性モデルによる評価、物性プロット、Free-Wilson 解析による新規化合物の提案を行う機能が直感的なインターフェースで実装されており、多数のパラメータの最適化を効率良く行えます。また、プロジェクトグループ間のデータの設定、標準化、共有も容易に行えます。MOEsaic は統合されたリガンドベースの設計環境を提供し、低分子創薬研究を強力に支援します。

「創薬研究情報共有クラウドシステム CDD Vault」篠崎康裕（株式会社モルシス）

CDD Vault は低分子をはじめとするサンプルとアッセイデータの管理、および電子実験ノート（ELN）の機能を持つクラウドサービス（SaaS = Software as a Service）です。低分子サンプルとバイオアッセイデータの一元管理、あらゆる実験を記録できる柔軟な ELN、利用場所を限定しないクラウドサービスの利点により、化学/生物学の分野や組織の壁・所在地の距離の壁を越えて研究者間のコラボレーションを強力に支援します。また、新規登録されたサンプルやアッセイデータの通知機能や、研究者間の業務連絡やディスカッションを促すメッセージボード機能により、研究のサイクルを滞りなく進められます。

リード化合物の登録から、合成実験の記録、アッセイ実験の記録と結果の登録、結果の分析まで、創薬研究の全場面で CDD Vault をご活用いただけます。



CBI学会2021年会 スポンサーセッション SS-04　10月26日(火) 13:00～14:30

Arxspan BioDriveのご紹介

【ご紹介要旨】

Arxspanは、Notebook(ELN)、Registration、Inventory、Assay、Searchより構成されるオールインワンの研究情報管理システムです。

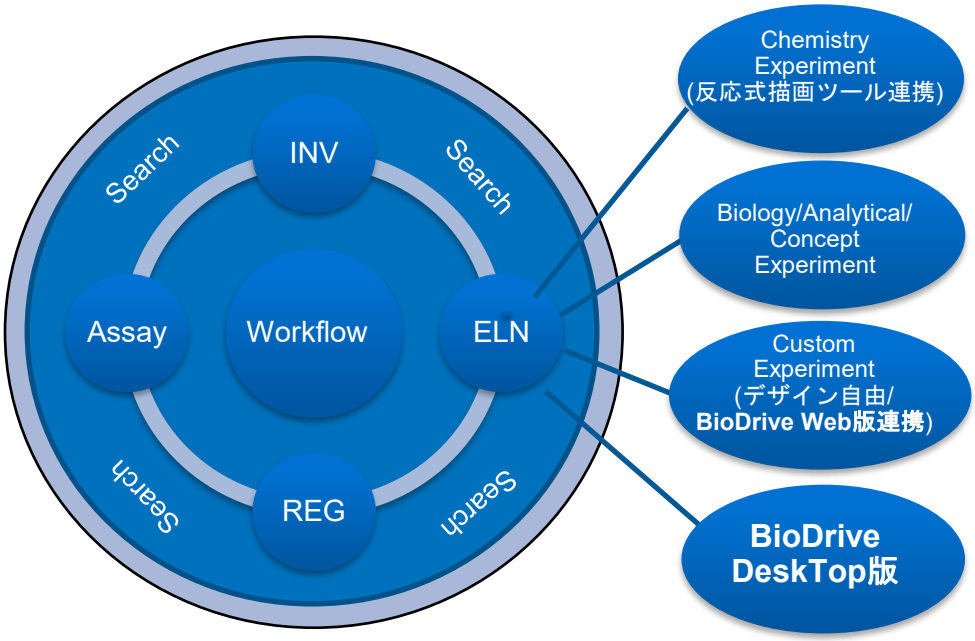
Arxspanは自社研究データ管理はもとより、近年増加傾向にあるCROへの委託業務やアカデミアとの共同研究等 社外パートナーとの協業業務に対し、クラウドの利便性を最大限活用し迅速なシステム展開、データ共有、データ回収に貢献しています。

この度分子生物学者向け描画ツール“BioDrive”がリリースされ、更に適応利用範囲が広がりましたのでご紹介致します。”BioDrive”はNotebook(ELN)内でご利用頂けるエンタープライズ版と、“BioDrive”単独でご利用頂けるデスクトップ版が用意されています。

BioDrive:

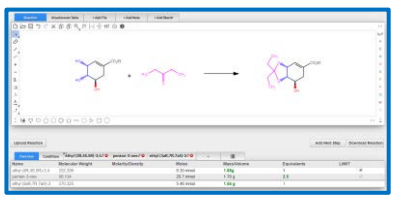
- 遺伝子配列、プラスミド、ベクターの作成、各種ファイルフォーマットによる入出力
- 配列、酵素、プライマーの表示、解析、注釈
- 選択配列内制限酵素の自動検出
- ライブラリーの注釈の自動検出
- 配列の生化学的性状の自動計算
- 遺伝子挿入、クローニング、ライゲーション機能
- 複数の配列と配列のアライメント
- 配列、キーワードによる洗練された検索機能
- DNA配列からアミノ酸配列への自動翻訳
- HEML準拠表記　他

- confidential -



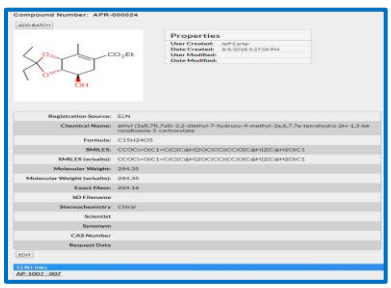
Notebook:

- 標準エクスペリメント(合成、生物、分析、着想)
- カスタムエクスペリメント（ユーザによるデザイン自由なフォーム）
- Auto Text機能、監査証跡機能　他
- 大容量添付ファイル保存可能。従来に比べ高速なアップロード



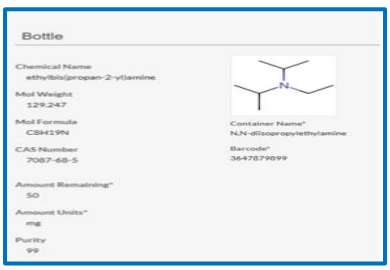
Registration:

- 登録物を自在に定義
  低分子, 中分子, 高分子, 蛋白質, セルライン, 動物他
- ID自動発番
- 登録物質毎にアクセス権設定（個人, グループ単位）
- 同一物質条件の設定、重複物質チェック
- Standardizerによる構造正規化機能
- バルク機能　登録/更新等



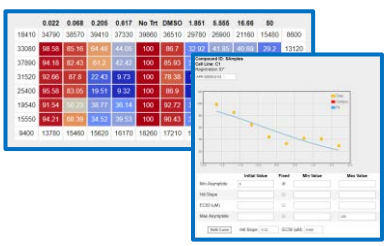
Inventory

- 管理用コンテナーと管理項目を自由に定義(構造式も扱えます)
- 管理場所, 管理体系をエクスプローラーライクに自在に設定
- フォルダー毎にアクセス権設定（個人, グループ単位）
- 登録から破棄までの監査証跡
- バルク機能　登録/更新/移動等
- バーコード、バーコードプリンターとのインテグレーション



Assay:

- 登録テンプレート設定機能
- カーブフィッティング機能
- IC50, EC50等各種計算機能
- ヒートマップ機能　他



富士通株式会社　https://www.fujitsu.com/jp/dlp/
ソーシャルデザイン事業本部デジタルラボ事業部
E-Mail: contact-dlp@cs.jp.fujitsu.com

ブルカージャパン株式会社　http://www.bruker.com
バイオスピン事業部ソフトウエアシステム　Tel:045-444-1390

- confidential -

SS-05

AI創薬における人間要素

創薬研究がかつてないほど多くのデータを生み出し、コンピューターへの依存度を高めるにつれ、研究者の役割は変化しています。Jubilant Biosysは、この変化の最前線にいます。550人以上の研究者の、合わせて4000年以上の研究経験は、コンピューターには対処不可能な、創薬プロセスにおける意思決定に焦点を当てています。

創薬プロジェクトの全体像を俯瞰し、さまざまな専門知識を活用し、共同研究で創薬研究の複雑さに取り組む能力が、Jubilant BiosysをCROとして選択されるだけでなく、75以上の成功した創薬プロジェクトにおいて、世界の革新的な企業の信頼できるパートナーとしています。

次世代の課題やAI主導の創薬に取り組むために、私たちがどのように協力できるか、お話させていただけませんか？皆様のAI創薬で生まれたバーチャルな化合物を、現実の医薬品候補化合物とするお手伝いをさせていただけませんか？

日本担当：城戸　佳織

Email: kaori.kido@jubilantbiosys.com

Webisite: https://www.jubilantbiosys.com

Integrated drug discovery partnership

Comprehensive Chemistry Services

Structural Biology & Custom Protein Production

In-vitro & in-vivo Biology Services

Contract Manufacturing

ADDED DIMENSION IN DRUG DISCOVERY

講演テーマ「AI創薬に付加価値を加える」

Application of in Silico Methodologies to Hit/Lead Optimization. A case study.

インシリコ手法による、
ヒット最適化のための
応用事例紹介
（英語によるプレゼン）

Jeyaraj D.A

Ph.D., Vice President, Discovery Chemistry

Identification of Novel Biological Targets Assisted by AI

AI補助による、
新規ターゲットの同定
（日本語によるプレゼン）

Takeshi Yura

Senior Vice President, CSO & Site Head, Bengaluru

Design and Optimization of Compounds from a DMPK viewpoint

DMPK の観点から見た、
化合物のデザインと最適化
（英語によるプレゼン）

Ravi Kumar Trivedi

Ph.D., Assistant Vice President, Head DMPK & Toxicology

Moderator:

Kaori Kido, Ph.D., MBA,
Senior Director Business Development, Jubilant Biosys Ltd.

InsightfulScience

+

dotmatics
knowledge solutions

ドットマティクスは *Insightful Science* と統合し、
世界最大のクラウドファースト・研究開発プラットフォームを
提供する企業となります。

詳しくは *dotmatics.com/ja* へ

ドットマティクスが提供するAI/MLプロトタイプと *Cerevel Therapeutics* 社の事例

10月26日（火）13:00〜14:30

弊社は、ライフサイエンス向けの世界的大手ソフトウェア・プロバイダーである*Insightful Science*（インサイトフルサイエンス）社と統合し、世界最大のクラウドファースト・研究開発プラットフォームを提供する企業となりました。本プレゼンテーションでは、*Insightful Science*社との統合についてのご説明したあと、弊社の電子実験ノートや解析ツールと連携する最新のAI/MLプロトタイプをご紹介いたします。さらに、中枢神経疾患の医薬品を開発するバイオ医薬品企業である*Cerevel Therapeutics*（セレヴェル・セラピューティックス）社から顧客事例をご紹介させていただきます。データセキュリティを最重要視する*Cerevel Therapeutics*社が、スタートアップに最適なソリューションとしてドットマティクスを選んだ理由とは？同社の医薬品化学部門のディレクター、*Hanh Nho Nguyen*氏の講演を本大会向けに日本語字幕付きで配信いたします。

*Cerevel Therapeutics*社の*Hanh Nho Nguyen*氏は、中枢神経系（CNS）疾患を治療するための新薬を開発する同社の医薬品化学部門のディレクターです。疾患領域全体での創薬および低分子（*SM*）創薬に関する確かな専門知識を有する*Hanh*氏は、前職の*BlinkBio*社で*Tunable Drug Conjugate*（*TDC*）プラットフォームを開発し、*Amgen*社では臨床候補化合物*AMG 900*の同定や前臨床のスケールアップに大きく貢献しました。また、ミシガン大学から博士号を取得した後、*MIT*で博士研究員を務めた経歴があります。

ドットマティクス株式会社
【TEL】03-4577-1480　【FAX】03-4577-1481
【お問い合わせ】info@dotmatics.com
【WEBサイト】https://www.dotmatics.com/ja

Cresset社Flare™による分子デザインと結合自由エネルギー(FEP)計算の最新動向

日時：2021/10/26 (火) 13 : 00-14 : 30 (ルーム開放15 : 00 – 16 : 30)

結合自由エネルギー(FEP)計算は、薬物分子設計において、ターゲット分子と薬物分子との相互作用を高精度に見積もる上で、強力な武器となります。本セッションではCresset社Flare™を用いたFEP計算事例を東京工業大学の大上先生にご講演いただきます 。

また、Flareの最新バージョンの特長を活かした分子デザインについてCresset社より併せて紹介させていただきます。

Flare™ V5: SBDD+LBDDによる分子デザイン ― 結合自由エネルギー、ダイナミクス、QSAR

原 隆一郎 (Senior Application Scientist, Cresset)

標的タンパク質と薬候補分子の静的結合構造は、活性サイトの水の熱力学的安定性の空間分布(3D-RISM)に基づくリガンドの最適化や、ドッキングシミュレーションによりバーチャルスクリーニングを可能とする。一方で、生体分子の動力学シミュレーション(MD)は、結合予測ポーズの安定性評価、一連のリガンドシリーズの結合自由エネルギーの予測(FEP)、溶媒分子の統計学的熱力学的挙動(GIST)を求める等の手法に展開される。力場パラメータはMD実験の精度を大きく左右するため、チューニングを可能とするインターフェースも求められる。

活性配座(の仮説)があれば、3D-ファーマコフォアの重ね合わせにより構造的特性と活性の相関を可視化し分子設計のヒントを得たり、機械学習により活性予測(3D-QSAR)モデルを構築することもできる。さらに動態特性(ADMET等)や膜透過性など分子に帰属する特性は2D-分子記述子の学習でも多くの知見が得られる。

Flare V5上ではこれら最新のSBDD＋LBDDのアプローチを必要に応じて組み合わせるばかりでなく、すべての機能をPython言語から利用でき外部ライブラリとともにカスタマイズも可能である。

本講演では、創薬において実際にFlare V5を用いた分子デザインのケーススタディを紹介する。

TSUBAME 3.0によるCresset Flare FEP計算の展開

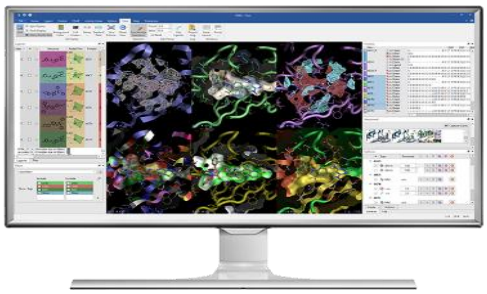
大上 雅史 先生 (東京工業大学 情報理工学院)

結合自由エネルギー計算を行う代表的な手法である自由エネルギー摂動法 (free energy perturbation, FEP) は、構造的に類似したリガンド分子間の結合自由エネルギー差$\Delta\Delta G$を高精度に予測できることから創薬プロジェクトへの応用が進んでいる (*J Chem Inf Model* 60: 5457–5474, 2020. 等)。しかしながらFEP計算はMDを多用するため、計算結果を迅速に取得するには多くの計算資源を利活用できることが重要である。本講演では、Flare FEPを用いた大規模FEP計算の事例として、我々が東京工業大学のTSUBAME 3.0スーパーコンピューターで実際に行ってきた計算の取り組みについて、クラスタマシン上でのFlareの実行ノウハウ等も含めて紹介する。

皆さまのご参加をお待ち申し上げております。

Cresset社からFlare™ V5がリリースされました

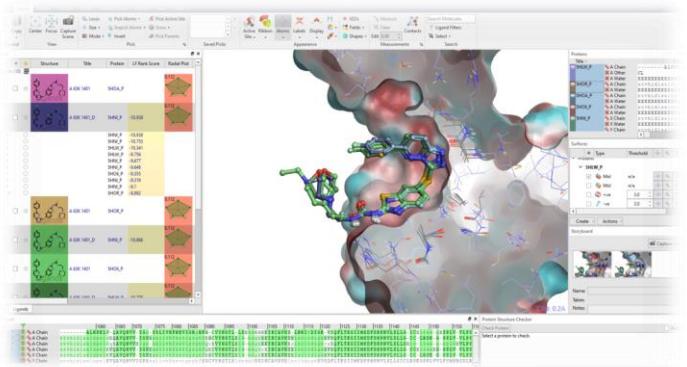
Flare V5は、これまでのSBDDを中心としたFlareの機能に加えて、LBDD（3D-QSAR）のプラットフォームであったForgeの機能を全て継承し、創薬・分子設計のための統合的プラットフォームとなりました。その利便性を高めるためにGUIの機能にも大幅な改良が加えられ、随所で計算の高速化を実現し、一層充実した計算化学手法を備えています。また、Flareの機能の全てをPython言語によりアクセスが可能であり、カスタムスクリプトを書いたり、機能をカスタムに拡張したりする事もできます。



Docking many ways

シンプルなドッキング、テンプレートドッキング、マルチレセプタードッキング、コバレントドッキングなどのドッキングシミュレーションを選択できます。

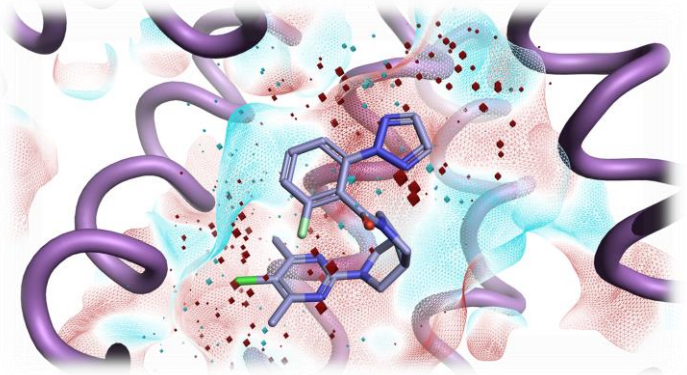
類似レセプターであればシーケンスアラインメント・重ね合わせして相互作用を総合的に可視化できます。



FieldQSAR

Field point（静電場、立体、疎水性）によりリガンドの分子の精度の高いアラインメントをすることにより、活性を決定する構造との相関を調べます（定性的可視化と定量的活性予測モデルの構築）。

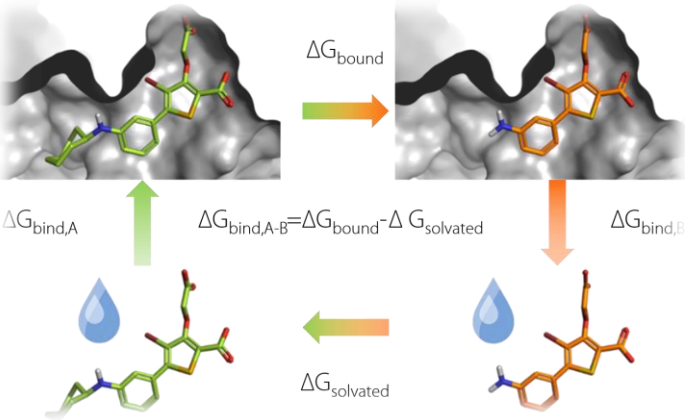
Activity cliff等のビジュアル化を実現し、効果的な分子モデリングを可能とします。



FEP

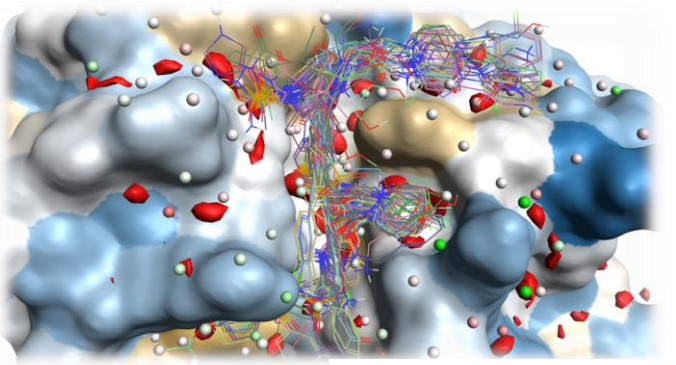
精度の高いFEP実験設定を自動化します。中間体の発生も含めてリガンドネットワークを自動生成します。各リンクのλ-windowsを非等間隔適用的に設定し計算効率化します。MDは速度最適化されており、Amber/GAFF2・OpenFF力場のチューニングが可能です。

得られた各リンクのΔΔGをもとに実験最適化法により、各リガンドの結合自由エネルギーを高精度で見積もります。



Water analysis

水をプローブとして、複合体、アポ体のポケット内の特徴を解析し、リガンドの最適化をすることができます（3D-RISM, GIST）。



問い合わせ先
Cresset代理店：ライフマティックス株式会社 ライフサイエンス事業部
souyaku@lifematics.co.jp　https://lifematics.co.jp/

SS-11

株式会社 Elix は「創薬を再考する」をミッションとしたAI 創薬企業です。

ELIX

優秀な AI リサーチャー・AI エンジニアに加え、化学・生物学・物理学等の異なる専門性を持つ、博士号取得者多数を含むメンバーで構成されています。会社の公用語を英語とし、10 カ国以上の異なる国からトップクラスの優秀なメンバーを集めることにより、高い研究開発力・技術力を実現しています。

SESSION

10月26日|火| 15:00-16:30 zoom ブレイクアウトルーム (SS-11)

01 Building an AI Drug Discovery Platform at Elix, Inc.

This presentation will introduce the modular architecture of the Drug Discovery Platform, and the capabilities of each module, including state of the art graph models for prediction, custom implementations of leading generative models, and the mechanics of active learning for experimental data collection.

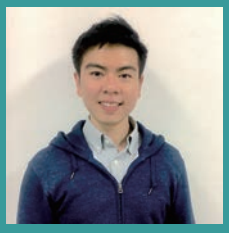
登壇者 株式会社 Elix Casey Galvin

02 Target Discovery in the age of Big Data and AI

We will review the recent progress in the field of target discovery/optimization using ML, discuss the challenges and potential insights into future progress in the field.

登壇者 株式会社 Elix Nazim Medzhidov

03 Towards Generating Synthesizable de novo small Molecules



This talk will briefly discuss about the advantages and disadvantages of two different paradigms of approaching generation of de novo small molecules.

登壇者 株式会社 Elix Jun Jin Choong

※講演内容が変更となる場合がございます。

招待講演

10月26日|火| 13:00-14:30
「Elix における AI 創薬と最新動向」

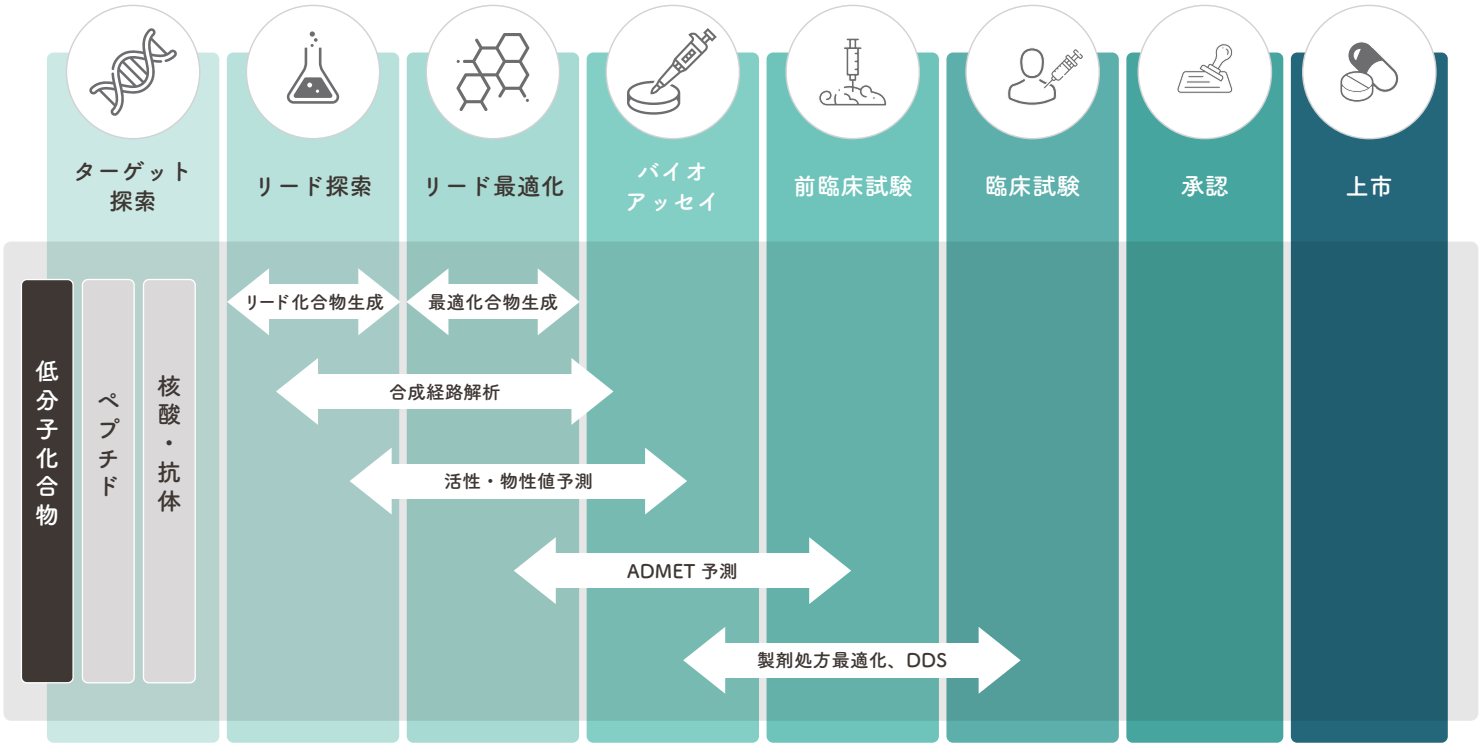
登 壇 者： 株式会社 Elix CEO 結城 伸哉
開催場所：I - 02

同時出展 企業セッション

全日程 12:00～
Elix の AI 創薬プラットフォームの紹介

開催場所： Remo ブース

ヒット化合物の探索から候補化合物の創出まで
Elix の全ての技術を結集したプラットフォームを提供



これらの技術を活用した共同研究も好評をいただいております。

FEATURE
Elix の特徴

高い技術力
最先端の独自技術で数多くの
モデルを保有。

豊富な実績
トップクラスの企業、研究機関、
大学との実績と信頼。

ノウハウの提供
秘密主義の企業が多い中、
透明性を重要視し、
一気通貫でサポート。

主要取引先

astellas / AsahiKASEI / BRIDGESTONE / NIPPON SHOKUBAI / 株式会社三菱ケミカルホールディングス / SHOWA DENKO 昭和電工株式会社

他多数の製薬会社様と取引実績がございます。

研究機関

RIKEN / 京都大学大学院 医学研究科

採択プログラム

Blockbuster TOKYO / NVIDIA INCEPTION PROGRAM

ELIX

お気軽にお問い合わせください。お待ちしております。

株式会社 Elix　〒102-0081 東京都千代田区 四番町 8-34 第 2 東郷パークビル 3 階
elix-inc.com/jp/　info@elix-inc.com

Protein Data Bank Japan
https://pdbj.org

CBI 学会 2021 年大会　スポンサーセッション　SS-12
2021 年 10 月 26 日(火) 15:00-16:30

1. コロナ禍における PDB の活動と構造データの品質向上およびデータ検証の取り組みについて

大阪大学蛋白質研究所　栗栖源嗣

PDBj(PDB Japan, https://pdbj.org/)はタンパク質等の生体高分子の構造情報をデータベース化し，世界で唯一の蛋白質構造データバンク(PDB)を無償で公開しています。今回のセッションでは，コロナ禍において，必要なデータをどの様に迅速に提供しているのか，また，PDB データの品質向上のために行っているデータ更新プロジェクト，さらに Cambridge Structural Database (CSD)を活用したデータ検証の現状についてお話しします。

2. wwPDB がデータ検証で用いる CSD を活用した BUSTER による構造精密化事例について

大阪大学蛋白質研究所　中川敦史

2019 年 6 月以降，wwPDB(worldwide Protein Data Bank)は Global Phasing Ltd.が提携する結晶学的精密化ソフト BUSTER と CSD の Mogul を積極的に利用して作成した制限情報(Restraint File)を活用してタンパク質に結合したリガンドの構造化学と電子密度への一致度を評価しています。Mogul を活用した制限情報を使うことで，構造化学的により信頼性の高い構造を導き出し，最も確からしい電子密度を得ることができます。講演では，実際に BUSTER を使って構造精密化した実例についてお話しいたします。

PDB は今年設立 50 周年を迎えます！

PDBj 事務局
565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2
大阪大学蛋白質研究所プロテインデータバンク研究室
Email: db_sec@protein.osaka-u.ac.jp
TEL:　06-6879-4311 (事務局)　8634 (登録事務局)

3.Data integration to facilitate drug discovery

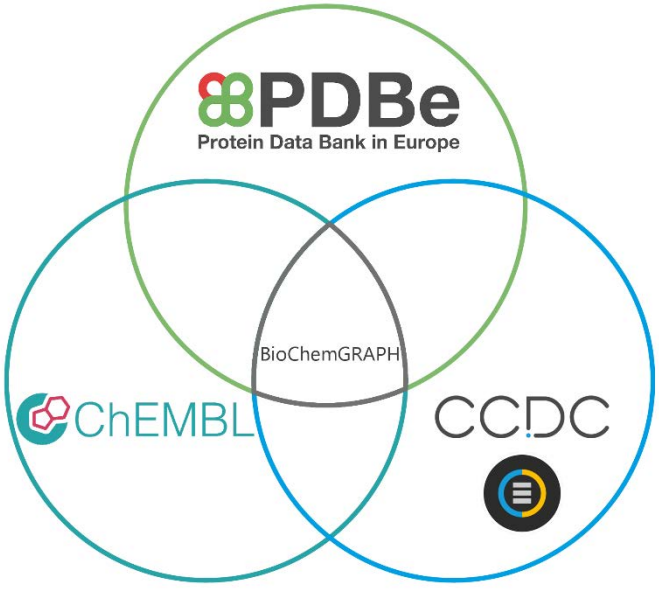
Francis L. Atkinson
Cheminformatics Data Scientist
Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)
Email: fatkinson@ccdc.cam.ac.uk

Several data resources for chemical and biochemical data relevant to structure-based drug design exist. However, much time must currently be spent by drug discovery researchers to standardise, curate, and integrate data from these multiple resources to gain a comprehensive understanding of biological systems.

A recent collaboration between EMBL's European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI) and the CCDC will allow the aggregation of data on small molecules and related macromolecules together into a knowledge-based platform developed by the Protein Data Bank in Europe (PDBe). The collaboration, called BioChemGRAPH, will bring together data from the PDBe, ChEMBL and the Cambridge Structural Database (CSD) and will allow researchers to quickly access relevant information from trusted, but currently separate, datasets, helping to advance research in the fields of drug target validation, development, and repurposing. It will be possible to better answer questions like:

* How does this target behave?
* Where can this drug be repurposed?
* What potential side-effects could this candidate have?

In this talk we will describe the background to this project and the progress made to date.



国内連絡先：
化学情報協会
科学データ情報室
Email: crystal@jaici.or.jp

CBI 学会 2021 年大会 スポンサーセッション SS-13
日時：2021 年 10 月 26 日 15:00 – 16:30

新薬創出におけるクラウド活用の取り組み

Amazon Web Services では、HPC (High Performance Computing) やデータ分析、機械学習など様々な目的に適合する200を超えるサービスを提供しており、さらにこれらを組み合わせることで、研究者が自身の目的に適した研究環境の構築を行うことが可能となる。本セッションでは AWS の概要に加え、実際に創薬研究におけるクラウド活用の実例として、中外製薬株式会社 荒川晶彦様、角崎太郎様、西藤ゆかり様より、AI や分子シミュレーション、NGS 解析といった領域での活用についてご紹介いただく。

AWS で実現する研究者のための創薬研究基盤

原田 裕平
アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社 技術統括本部

AWS のクラウドサービスを活用することで、研究者の IT リソースに関わる煩わしい手間を排除し、価値創造にフォーカスした研究基盤を構築することができる。AWS では、特定のユースケースに対する 1 コンポーネントとして利用可能なサービスが数多くあり、これらを上手く組み合わせて利用することで、多種多様な研究者のニーズを満たす研究基盤を少ない労力で実現することができる。この考えを Building Block と呼んでいる。さらに HPC においては、スケーラブルなクラウドの特性を活用し動的に計算リソースを用意することで、計算機クラスタの台数の制約から生じるスケジュール調整や突発的な計算ニーズに対して待ち時間を生じさせることなく、必要な際に必要な量のリソースを確保することが可能となる。本セッションではまず、AWS の各サービスの基本的な概要や、HPC クラスタ環境を素早く実現する方法、ジョブの投入に応じて自動でコンピューティング基盤が立ち上がり処理が行われるオーケストレーションサービスである AWS Batch の紹介を行う。続けて Building Block を組み合わせた解析の例として、煩雑で工数がかかる前処理をワークフローとして定義することにより、高スループットを実現する解析自動化アプローチを紹介する。また、その環境をテンプレート化する事で、必要な解析環境をオンデマンドで迅速に立ち上げる方法も紹介する。

中外製薬の創薬研究における AWS 活用事例紹介

荒川 晶彦[1]、角崎 太郎[2]、西藤 ゆかり[2]
中外製薬株式会社
[1]創薬化学研究部 先端計算化学グループ
[2]創薬基盤研究部 データサイエンスグループ

中外製薬では「Chugai Digital Vision 2030」を掲げ、デジタル技術によってビジネスを革新し、社会を変えるヘルスケアソリューションを提供するトップイノベーターとなることを目指している。その基本戦略の 1 つとして「デジタルを活用した革新的な新薬創出」を設定し、創薬プロセスの革新・開発プロセスの革新・患者アウトカムの可視化を進めている。今回、創薬プロセスの革新に向けた取り組みの中で、AWS を活用した事例を 2 例紹介する。1 例目は計算化学を活用した創薬における事例で、AWS Batch を採用して AI や分子シミュレーション関連の大規模計算を効率的に実行できるコンピューティング環境について紹介する。2 例目は NGS 解析などの Bioinformatics における活用事例で、ワークフロー言語を採用して実験⇒解析⇒解釈をシームレスにつなぎ、Wet と Dry の研究員が利用できる解析プラットフォームについて紹介する。

AWS ヘルスケア・ライフサイエンスのご紹介ページ：
https://aws.amazon.com/jp/local/health/
お問い合わせ先：https://aws.amazon.com/jp/contact-us/

情報計算生物化学学会 ２０２１年大会 ワールドフュージョン スポンサーセッション

MoA データの活用と、意思決定ツールによる創薬の加速

スポンサーセッション SS-14　10 月 26 日　（火）　15：00 ～　16：30

Life Science Knowledge Bank（LSKB」は 遺伝子，タンパク質から疾患，微生物分野まで幅広く整理 搭載している探索システムである． 本セッションでは LSKB のデータを AI で活用した事例や，小野薬品工業様のツールの導入と、ファーマコビジランス向け薬剤のトランスレーショナルツール「Chemotargets Clarity®PV」を紹介する．

1. LSKB 新機能のご紹介～AI 学習で作成した MoA データと意思決定支援ツールの導入

緑川 淳　（株式会社ワールドフュージョン）

LSKB の 最新バージョンは ChEMBL 由来の疾患⇔ターゲット間、疾患⇔薬剤間のデータ更新と，新規 MoA の追加を行なったことで，ターゲットと疾患の関係が更新された。これらの更新により，さらなる疾患標的、Drug Repurposing への応用が期待できる．

さらに，ワークフロー機能を搭載した。本機能の応用により，多岐にわたる LSKB データ利用の最適化利用が容易となった。このあと紹介のエルピスマップを標準搭載したことで，自社 HTS データの可視化による意思決定の加速化を実現した．

2. ユーザーフレンドリーな新規可視化法「エルピスマップ」によるリード創製への見極め

－ビッグデータ解析のアンバイアスドメソッドによる「俯瞰・予測・判断」の提案－

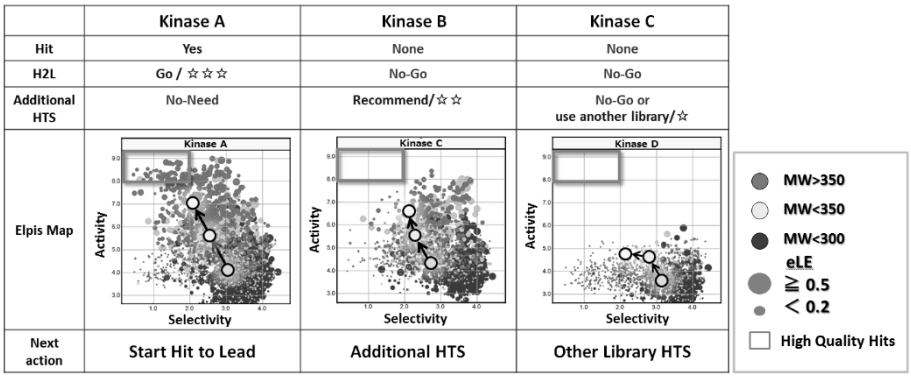
黒野昌邦（小野薬品工業株式会社）

創薬研究に利用できる社内・社外の情報は指数関数的に増大し，さらに AI 技術への注目などから，ビッグデータの有効利用法の開発が望まれている．例えば，公共データベースである ChEMBL では，約 211 万化合物，活性データは約 1,864 万データポイントが収載され、PubChem では，約 3 億もの活性データポイントが登録されている．このように大量のデータが，創薬分野でも日々蓄積される一方，インフォマティクスの専門家でない研究者が，膨大な情報を簡便に活用できる手段は，未だ不十分である．本発表では，メディシナルケミストが直面するビッグデータの一例として，HTS 等の結果解析を例に，膨大なデータを視覚的に捉え，リード化合物創製の可能性を予測し，次の行動を判断できるユーザーフレンドリーな新規可視化法である「エルピスマップ」を紹介する [1]．

一般的に，メディシナルケミストは，HTS の全データのごく一部（強い活性を示す化合物とその誘導体群）を精査し，活性，選択性，LE 値（リガンド効率）などの指標とともに，化学構造を加味して総合的に合成展開する化合物を選択する．その際，各自の成功体験や誘導体合成の経験の有無なども考慮され，良い意味でも，悪い意味でも，化学構造に対して無意識にバイアスが入りやすい．そこでメディシナルケミストの判断と別の切り口から補完的に新たなヒントを提供し，「**リード創製への見極め**」の精度向上の一助とするための新しい可視化法を開発した [1]．

本手法は，**フラグメント創薬での概念**を応用して，全ての HTS 結果を分子量で分類し，分類した化合物群の重心間を矢印で結び，そのベクトルの大きさや向きにより，リード創製の可能性を「**予測・判断**」できる手法である．これによって例えば，HTS を実施したライブラリーにヒット周辺の誘導体が無くても，ビッグデータの膨大なデータポイントを活用し，HTS の全データを俯瞰的に可視化すれば，何らかのヒントを見出すことが可能になる．メディシナルケミストは，構造類似性を重視して解析するが，本手法は，化学構造の類似性を使用しないという点で**アンバイアスドな「俯瞰・予測・判断」メソッド**といえる．また可視化法は数多くあるものの，散布図中に分布の代表点とベクトルを加える手法の報告例はなく，シンプルであるが独自性は極めて高い．本発表では，具体例を含めて報告する．

Copyright World Fusion Co., LTD



「**エルピスマップ**」の特徴は，以下のような判断の一助となる．

① **リード創製の可能性を見極め**られる．

② HTS 実施後に，追加 HTS，ヒットからの合成展開の **Go/No-go を決定**できる．

③ **複数ターゲット**の HTS 結果を比較した場合，**リード創製面でのプロジェクトの優先順位づけ**ができる．

「**エルピスマップ**」による可視化法は，HTS の結果解析のみでなく，因子を変えれば，アンバイアスな傾向を掴みたい様々な分野への応用も可能である．

1) M.Kurono, H.Egashira, J.Takeuchi. (PAT.WO2016/171220)

3. BERT による 新しい MoA 抽出と 読解エンジンとしての活用の可能性 （仮題）

緑川 淳（株式会社ワールドフュージョン）

AI と LSKB のデータを用いて求めた MoA は，機能に着目した疾患とターゲット間やターゲットと化合物間の展開に大きく役立つことを期待する。詳細は本セッションで紹介する．

4. Clarity PV: from Safety Pharmacology to Post-marketing Surveillance

Jordi Mestres （Chemotargets S.L.,）

Large amounts of data associated with safety issues are generated along the entire lifetime of drugs, from its infancy as preclinical leads, through its adolescence as clinical candidates, all the way up to its adulthood as marketed drugs exposed to the human population. Across the different stages in the life of a drug, some of the data collected initially may be confirmed and consolidated with data at an advanced stage, whereas other data may not be translated, and in some cases may even contradict, those safety signals that are ultimately observed in the human population. Collecting and properly integrating such an heterogenous pool of data is already a challenge in itself. But even if one manages to put all data together, the analysis is not straightforward, and it may require the assistance of purposely designed visual analytics tools.

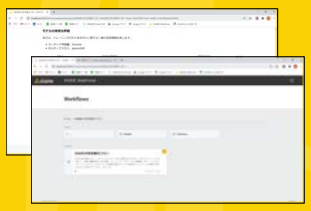
To this aim, we introduce Clarity PV, a new pharmacovigilance web-accessible platform that allows for performing translational safety analyses by connecting data from *in vitro* safety pharmacology, preclinical toxicology, clinical safety and post-marketing surveillance reports on over 9,000 small molecule drugs, combination drugs, and biologics. A thoroughly validated methodology has been implemented to detect consolidated drug-safety post-marketing signals and link them to pharmacology, preclinical and clinical biomarkers. The analysis of safety signals can be extended beyond individual drugs to drug classes and stratified by age, weight, gender and geographical location. A set of purposely designed analytics tools allows the user to visualise data and trends and perform comparative analyses between and across drug classes.

Copyright World Fusion Co., LTD
株式会社ワールドフュージョン：http://www.w-fusion.co.jp ： oshirase@w-fusion.co.jp

SS-15

KNIME × infocom

－ CBI学会2021年大会　講演情報 －
Zoomブレイクアウトルーム　SS-15
【ルーム開放】10月26日(火)13:00-14:30
【　講　演　】10月26日(火)15:00-16:30



KNIME 機械学習自動化パッケージ

本セッションでは、化合物の物性予測モデルの構築自動化を実現する「KNIME機械学習自動化パッケージ※」についてご紹介いたします。

※KNIME機械学習自動化パッケージとは?
機械学習の知識がない方でも、画面のガイドに従って設定するだけで手軽に予測モデルを構築可能とするパッケージです。これまではデータサイエンティストが時間をかけて行っていた予測モデルの構築作業をKNIMEが自動で行うため、データサイエンティストの作業負荷の低減も実現します。

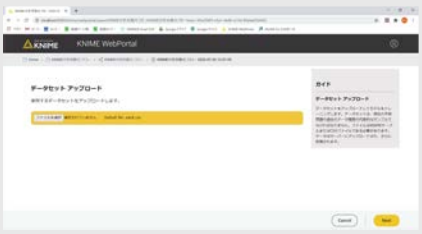
このような方におすすめ！

- 予測モデルを作成し、業務でAIを活用したい。
- 予測モデル構築のスキルや学習のための時間を節約したい。
- 自社向けに予測モデルをカスタマイズして利用したい。

ガイドに従うだけで、ベースとなる予測モデルを簡単に構築!

①データをアップロード

Excel、csv等のファイルをアップロードします。



②ガイドに従い設定

ガイドに従って設定するだけで、KNIMEが自動で複数の予測モデルを構築します。

③モデルをダウンロード

モデルの評価を確認し、必要なモデルをダウンロードすることができます。評価を受け、設定を見直して再構築することも可能です。

KNIME 機械学習自動化パッケージの特長

・WEBアプリケーションとして予測モデルを自動構築するためのワークフローを提供
・ワークフローは自由にカスタマイズが可能
・既存システムや、R、Python、H2O、Spark、TensorFlowとも簡単に連携可能
・作成した予測モデルは、すぐにWEBサービスとして運用可能

ヘルスケア領域での主な活例シーン

・化合物の物性予測モデルを構築したい
・化合物の安全性・毒性を予測したい
・医学文献を疾患ごとにタグ付けしたい
・バイオマーカー探索を効率化したい
・病理画像から異常を検知したい

紹介WEBページはこちら→ https://knime-infocom.jp/service/machinelearningautomation/

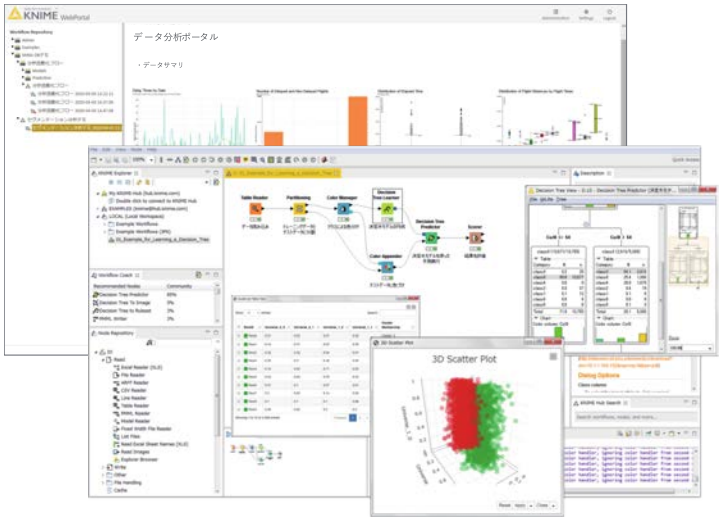
KNIME

https://knime-infocom.jp

KNIME Analytics Platform | KNIME Server

- 1ストップでデータの抽出・加工・分析・可視化までをサポート
- ワークフローのWEBアプリケーション化（WebPortal）
- 他システムとの連携＆自動化
- 予測モデルを作成し、業務でAIを活用

データの収集 ▶ データを統合・整形 ▶ データを分析 ▶ 分析モデルを共有して活用



KNIME の主な機能

- データプレパレーション
- 顧客のセグメンテーション
- 予測分析
- 各種ツール連携
- Webアプリ化
- 機械学習・AI活用

1ストップで分析業務をサポート

KNIMEはデータ分析だけでなく、データの抽出や加工といったデータプレパレーションや可視化までを同じプラットフォームで実現します。

誰でも分析ワークフローを作成

プログラムの知識がなくても、予め用意されたサンプルワークフローや2,000を超えるノードを組み合わせるだけで簡単に分析ワークフローを作成できます。RやPythonで作成したモジュールをそのまま組み込むことも可能です。

機械学習や AI を活用

ディープラーニングやロジスティック回帰などの、高度なアルゴリズムを使用して機械学習モデルを構築することができます。
分析モデルを自動的に構築するWEBアプリケーションも作成可能です。

本製品に関するお問い合わせ先

infocom インフォコム株式会社
ヘルスケアサービス部
〒150-0001 東京都渋谷区神宮前2丁目34番17号 住友不動産原宿ビル
TEL: 03-6866-3860 Email: info-science@infocom.co.jp https: //www.infocom-science.jp/

■ 記載の商品名等は各社の登録商標、または商品の場合があります。
■ 本カタログの仕様は予告なく変更する場合があります。
■ 本カタログの仕様は2020年7月1日現在のものです。

CBI 学会 2021 年大会　スポンサーセッション　SS-16

生体分子相互作用の理解と次世代抗体工学

シュレーディンガー株式会社

日時：2021 年 10 月 26 日（火）15:00-16:30

開催趣旨：生命現象の根本にあるものは、生体分子間の特異的な相互作用であるということができるでしょう。創薬研究の目的は、この緻密に制御された相互作用に介入し、制御する薬物の開発であることを考えれば、生体分子間相互作用の理解がいかに重要であるかは容易に理解されます。本セッションでは、この本質的で非常に重要な研究課題について、抗体を含む多様な生体分子を対象として、各種の物理化学的実験手法のみにとどまらず、計算・情報科学を駆使した先進的な研究を展開されている東京大学の津本浩平先生をお招きして、最新の研究成果についてご紹介をいただきます。また、シュレーディンガー株式会社からは、バイオロジクス・ソフトウェア・パッケージである BioLuminate の基本機能と抗原・抗体複合体の構造予測に関する事例についてご紹介します。

プログラム

タイトル：抗体の抗原特異性創出機構の解明と親和性向上指針の提案

津本浩平（東京大学　大学院工学系研究科）

抗体の de novo 設計は、蛋白質工学研究者の大きな目標の一つです。種々の方法論により、蛋白質の立体構造が次々と明らかになったのはこの 30 年余りのことですし、計算・情報科学を最大限に活用して、その機能あるいは相互作用プロセスに関する理解が深まったのはごく最近のことです。我々は、モデルとなる抗原抗体相互作用に関して、物理化学的ならびに計算・情報科学的アプローチを中心とした解析を通じて、その特異性創出機構を明らかにすることを目指して研究を進めてきました。結果として、どのように抗原特異性を創出できるか、その機構が記述できたほか、抗原親和性をいかに向上させるかについては明確な指針を提案できています。今後は、抗体の de novo 設計に向け、いよいよ、計算・情報科学的アプローチが中核となる研究が重要になってくるものと考えられます。ここでは、以上の内容について、我々の研究成果を中心に紹介し、今後の展開を議論したいと思います。

Schrödinger's approach to physics-based antibody analysis and design: modeling of antigen-antibody complexes with disordered epitopes

市原収（シュレーディンガー株式会社）

シュレーディンガーの創薬プラットフォームは、物理学の第一原理に基づいた計算化学技術を駆使することで、タンパク質立体構造情報に基づく高度な薬物設計を可能とし、そのソフトウェアは、世界中の主要製薬企業で活用されています。本セッションでは、BioLumimate を用いた一般的な抗体の 3 D モデリング技術に加えて、タンパク・タンパク・ドッキングを用いた抗原抗体複合体構造の予測や、自由エネルギー摂動法（FEP）によるアフィニティ・安定性予測などについて解説します。また、単独では特定の安定コンフォメーションを持たない Disordered エピトープを有する抗原について、MD シミュレーションと Orithogonal な実験データを活用した、抗原・抗体複合体構造推定の可能性について議論します。

BIOLOGICS BY DESIGN

Cutting-edge software for modeling different types of biologics, including monoclonal antibodies, vaccine antigens, enzymes, and peptides

ANTIBODY MODELING

- Reliable structure prediction from sequence
- Automated intuitive workflows
- Advanced *ab initio* CDR loop prediction using PRIME
- Antibody humanization by CDR grafting
- Regularly updated and curated antibody database

LIABILITY PREDICTION

- Rapid protein surface analysis
- Protein aggregation prediction with AggScore
- Chemical liability prediction
- QSAR analysis for biologics

ADVANCED PROTEIN ENGINEERING

- *In silico* mutagenesis and scoring
- Cysteine scanning and design of disulfide bridges
- Protein FEP+ for prediction of relative free energy changes
- Fusion protein linker design

PROTEIN DOCKING

- Well-validated docking code, PIPER
- Proven track record in community-wide blind prediction competitions
- Antibody and Standard (Protein or Nucleic Acid) modes
- Protein-Peptide docking

COMPREHENSIVE PROTEIN MODELING

- Advanced tools for sequence alignment, with extensive annotation options
- Complete set of homology modeling tools, including both rapid and high-accuracy methods
- Easy to interpret protein structure quality analysis
- Residue-based analysis of energies, solvent-accessible surface areas, and hydropathy
- Molecular Dynamics simulation using Desmond

〒100–0005 東京都千代田区丸の内1–8–1
丸の内トラストタワーN館 13F

URL: www.schrodinger.com/schrodinger–kk

Email: info–japan@schrodinger.com

Tel: 03–4520–7090

SCHRÖDINGER®

SS-17

CBI 学会 2021 年大会 スポンサーセッション SS-17

SYNTHIA™ 逆合成解析ソフトウェアのご紹介

逆合成解析を支援するソフトウェアSYNTHIA™をご紹介します。
ドラッグライクな低分子化合物の合成経路探索の活用事例ならびにデモンストレーションを是非ご覧ください。

日時 10月26日（火）15:00～16:30

講演者

Dong-Hwi Kim
Technical Application Scientist, Cheminformatics Technologies, Merck KGaA

田中紀子
シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社 コマーシャルマーケティング部 ケミストリー担当

セミナー参加者様への特典

1. 導入を具体的にご検討のお客様に、SYNTHIA™を1週間無料で体験できるフリーアクセスプログラムをご用意しています。
2. アンケートにお答えいただいた方の中から抽選で3名の方に、「シグマ アルドリッチ オリジナルモバイルチャージャー」をプレゼントします。

お問い合わせ・ご回答はこちら
https://bit.ly/39pBkuX

SYNTHIA™とは ― 有機合成化学の支援ツール ―

目的の化合物に至る合成ルートを設計する上で最大の課題は、膨大な文献や自身の経験・知見を元に、数多くの可能性の中から真に実用的な合成ルートを見出すことでしょう。化学者が化学者のために精査した反応ルールを収載したSYNTHIA™は、有機化学とコンピュータ科学がタッグを組み15 年以上かけて開発された逆合成解析ツールです。SYNTHIA™は迅速に多数の合成経路を提案し、化学者がより困難で高度な合成経路の設計にフォーカスできるよう支援します。

有機化学者が反応ルールをコード化

反応ルールに基づき、各ステップごとに、立体選択性、位置選択性を含めた反応の選択性、共存し得ない官能基の影響を分子全体で評価します。

- 報告例のない新規分子や新規ルートを提案
- 検索条件を指定可能
- 100,000 以上の反応ルールを収載

1000 万化合物のネットワーク

- 合成経路を迅速に多数提案
- 市販試薬を出発物質とする合成経路を提案
- 新たな気づき、見落としの防止
- 新規合成経路の創出と特許展開
- 研究の時間とコストを削減

シグマ アルドリッチ ジャパン リサーチ事業部
〒 153-8927 東京都目黒区下目黒 1-8-1 アルコタワー 5F
製品の最新情報はこちら www.sigmaaldrich.com/JP/ja
シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社はメルクのグループ会社です。

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the U.S. and Canada.

Sigma-Aldrich®
Lab & Production Materials

FS-01

日時: 2021 年 10 月 26 日 15:00-16:30

生命の起源:意識の起源に向けて
Origin of Life: Toward Origin of Consciousness

開催趣旨:
CBI 学会年大会で開催してきた「生命の起源」フォーカストセッションも今年で 4 回目となります。今回は、生命系の最も高次の構造とも言える「意識」の起源について、科研費・学術変革領域研究(B)「クオリア構造と情報構造の関係性理解」の班代表を務めておられるお二人の先生にご講演いただき、議論を深めていきたいと思います。

モデレーター: **田中 成典 Shigenori Tanaka**
神戸大学 Kobe University

1. クオリア構造の脳活動(15:00-15:35)
山田 真希子 Makiko Yamada
量子科学技術研究開発機構 National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

意識の質、クオリアについてのこれまでの主要な脳科学研究は、錯視・錯覚を利用したものが多い。例えば、ルビンの壺のような多義図形や両眼視野闘争では、２つの視覚像のどちらか一方のみが意識にのぼり、一定の間隔で切り替わる。このような錯視・錯覚を利用することで、外界の刺激が一定であるにも関わらず、意識内容と相関して変化する脳活動が特定されてきた。しかし、従来の研究では、意識の質を、特定の視覚像が見えたか見えなかったかといった二値的な問題に矮小化し、それに対応する脳活動を検討するというものがほとんどであり、クオリアそのもの（例えば主観的に感じるりんごの赤さ）を脳活動で捉えることはできていなかった。本講演では、これまで定義することが難しいとされてきた意識の質・クオリアにアプローチするために、「米田の補題」の考え方を応用してクオリアをその周りとの関係性から特徴づけ、脳活動パターンからクオリア構造を同定するという、我々の新たな意識研究の取り組みを紹介する。

2. クオリア構造の定量化に基づく意識の理論の検証(15:35-16:10)
大泉 匡史 Masafumi Oizumi
東京大学大学院総合文化研究科 University of Tokyo

現在、様々な意識の理論が提案されているが、これらの理論を実験的に検証し、理論の正当性、有用性を確かめる方法論が確立されていない。その原因は、意識の質（クオリア）は、他人に伝えることができない、言語化できない、定量化不可能なものであるという、思い込みにあった。たしかに、ある特定の意識の質、例えばあなたが見ている赤の赤らしさそのものを説明することは不可能に思える。しかしながら、ある意識の質に対する他の意識の質との関係性は定量化できる。具体的には例えば、「赤」は「オレンジ」には似ているが、「青」には似ていないといった関係性は定量化可能なものである。我々は、このように定量化可能なクオリア同士の関係性（これをクオリア構造と呼ぶ）に対して、意識の理論を検証するという方法論を提案する。

3. 総合討論(16:10-16:30)

FS-02

日時: 2021 年 10 月 26 日 15:00-16:30

医療データ AI 解析実践フォーラム
Medical Data AI Analysis Forum

開催趣旨:

医療データの AI 解析は研究デザインから始まり、データ取得、前処理、統計解析、機械学習等の幅広いデータ解析の技術が必要である。AI 解析技術は日進月歩で進化しており、最新の技術情報とノウハウが必要である。本フォーラムでは、医療データの最先端の AI 解析に実際に取り組んでいる研究者が研究発表を行い、技術情報共有を行う。医療データ AI 解析に実際に取り組んでいる研究者、これから始めようという研究者にぜひご参加いただき、医療データの AI 解析を実践している研究者の交流の場としての本フォーラムの今後の開催についてもオープンに議論したい。

モデレーター: **水野 聖士 Satoshi Mizuno**
東北大学 Tohoku University
小島 諒介 Ryosuke Kojima
京都大学 Kyoto University
荻島 創一 Soichi Ogishima
東北大学 Tohoku University

1. **趣旨説明**

2. **グラフニューラルネットワークを用いた医療関連データ処理**
小島 諒介 Ryosuke Kojima
京都大学 Kyoto University

3. **大規模コホートデータを使用した早期疾患予測モデルの検討**
水野 聖士 Satoshi Mizuno
東北大学 Tohoku University

4. **データ駆動型研究のためのモデリング・アルゴリズム・数理**
松田 孟留 Takeru Matsuda
理化学研究所 RIKEN

5. **地域のレセプト情報に基づく介護需要の将来推定**
佐藤 淳平 Junpei Sato
東京大学 University of Tokyo

FS-03

日時： 2021 年 10 月 26 日 15:00-16:30

創薬の加速化を目指したインシリコ予測
～若手研究者が拓く新時代～
Accelerating drug discovery through in silico prediction

開催趣旨：
多くの研究分野で安全性に関する重要性が急速に高まっており、化学構造から生理活性や毒性を予測する研究への期待や役割が急速に拡大している。本セッションでは、若手研究者による、これまで困難とされてきた創薬や安全性の課題の解決を目指す挑戦的な研究を中心に議論を深めたい。なお、本セッションは計算毒性学研究会と若手の会の協賛として開催する。

モデレーター： **曽根 秀子 Hideko Sone**
横浜薬科大学
Yokohama University of Pharmacy
渡邉 怜子 Reiko Watanabe
国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所
National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

1. P-glycoprotein 輸送能を考慮した中枢移行性予測

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

薬物の中枢移行には、脳毛細血管内皮細胞（BCEC）から構成される血液脳関門に発現する複数のトランスポーターが関与しており、P-glycoprotein（P-gp）は最も重要なトランスポーターの一つとして知られている。本発表では、P-gp 輸送能・脳ホモジネート結合率・血漿タンパク結合率を予測する in silico モデルを構築し、BCEC における P-gp 輸送能を考慮した脳-血漿中薬物濃度比（Kp,brain）および脳-血漿中非結合型薬物濃度比（Kp,uu,brain）を構造情報から予測し、ラットの実験データを用いて検証した結果を報告する。

2. 生物学的メカニズムに基づいた薬剤性肝がん誘発薬物予測モデルの構築と評価

黒崎 宏太 Kota Kurosaki、植沢 芳広 Yoshihiro Uesaw
明治薬科大学 医療分子解析学研究室
Department of Medical Molecular Informatics, Meiji Pharmaceutical University

薬剤性肝障害(DILI)は医薬品の市場撤退の最も一般的な理由の１つである。近年、ビッグデータと人工知能を活用し、DILI 誘発薬物のスクリーニングを達成するニーズが大きい。しかし、薬物の肝毒性評価が困難であることから、DILI 予測のためのデータセットの構築が課題とされてきた。また、薬物への暴露から DILI 発症に至る、「分子」と「アウトカム」間のメカニズムのギャップを埋めるために、生物学的メカニズムに基づいた DILI 予測モデルを構築することが望ましい。本発表では、有害事象ビッグデータを応用し、薬剤性肝がん誘発薬物の評価・アノテーション手法、及び薬物の誘発する生物学的イベントを介した in silico 予測手法を提案するとともに、その毒性発現メカニズムを解釈する試みについて述べる。

3. Mpro の阻害予測を目指した構造記述子の検討と課題

江崎 剛史 Tsuyoshi Esaki
滋賀大学 Shiga University

薬の化学構造と生理活性の関係性を見出す研究への期待は大きく、その研究効率を高めて有効な化合物を見出すために、計算科学手法が広く使われるようになってきた。2020 年より世界を震撼させている新型コロナウィルス感染症（COVID-19）の治療薬の開発も同様に、計算科学を用いた候補化合物の探索が行われおり、メインプロテアーゼ（Mpro）の立体構造と阻害試験の結果が公開されている。そこで、Mpro の阻害に有効な構造特徴量を見出すため、複数の Fingerprint を適用して阻害性との相関解析の検討を行った。本講演では、その結果と課題を合わせて報告する。