

10月28日 (木)

Zoom ブレイクアウトルーム

<ランチタイムセミナー>

- LS-03** エルゼビア・ジャパン株式会社..... 1
『Elsevier R&D solutions のご紹介～化学反応情報の活用～』
出羽 俊和 (エルゼビア・ジャパン株)

<フォーカストセッション>

- FS-08** 「化学データサイエンスおよび人工知能討論、勉強会」立ち上げ会：
計算毒性学研究会主催..... 3
モデレーター：湯田 浩太郎 (株インシリコデータ)、
植沢 芳広 (明治薬科大学)、
金子 弘昌 (明治大学 理工学部)

講師：

金子 弘昌 (明治大学 理工学部)

「人工知能を活用した分子設計・材料設計」

結城 伸哉 (株式会社 Elix)

「はじめての AI 創薬と Elix における事例紹介」

古田 一匡 (富士通株式会社)

「富士通が考えるニューノーマル時代の研究スタイル」

大内山 浩 (インテル株式会社)

「インテルの AI に向けての取り組み」

- FS-09** ペプチド創薬を指向した計算科学の最前線..... 4

モデレーター：渡邊 博文 (ウイズメーティス)、

山岸 賢司 (日本大学)、石川 岳志 (鹿児島大学)

講師：

谷田 義明 (富士通研究所)

「溶液中における環状ペプチド分子の前処理付構造予測計算」

原田 隆平 (筑波大学 計算科学研究センター)

「ペプチドの膜透過性を評価する分子シミュレーション技術の創出」

石川 岳志（鹿児島大学 理工学研究科）

「ドッキング計算を利用したヒト主要組織適合抗原とペプチドの結合親和性計算法の開発」

情報計算化学生物学会2021年大会ランチョンセミナー 「Elsevier R&D Solutionsのご紹介～化学反応情報の活用～」

日時: 2021年10月28日(木) 12:00-13:00

講演者: 出羽俊和
エルゼビア・ジャパン株式会社
ライフサイエンスソリューションコンサルタント



エルゼビアは、電子ジャーナルをはじめとした各種のオンラインデータベースの提供にとどまらず、Information analytics companyとして、データ駆動型R&Dを支援しています。

本ランチョンセミナーでは、データ駆動型R&Dを推進するためのエルゼビアのソリューションの中から、Reaxys Contents IntegrationとEntellect Reaction Workbenchについてデモを交えてご紹介します。

1. Reaxys Contents Integration

- 電子実験ノート等に登録した自社の反応情報等をReaxys上で統合参照

2. Entellect Reaction Workbench

- Reaxys収録の高品位な反応情報を基に、各種の予測モデル構築を行うためのプラットフォーム

Reaxysの主な特徴

1. 化学研究で実際に必要な「データ」そのものを提供

- 化学関連論文や特許から必要な「情報そのもの」を的確に抽出して提供
- 1700年代からの価値のある反応、実測物性値情報を収録
- 情報源：ジャーナル約16,000誌、特許(WO/US/EP、アジア特許)
- 傾向分析に対応した充実したフィルタ

2. シンプルかつ直観的なインターフェース

- 構造検索とキーワード検索に対応したQuick Searchと複雑な掛け合わせ検索に対応したQuery Builderを搭載
- 文中の言葉の前後関係を考慮した自然言語処理に対応したテキストサーチ
- 検索結果候補を複数提示するSuggestionオプション
- 合成法、化合物ごとに複数の情報源から情報を集約したデータ構成





[Reaxys: 製品概要](https://www.elsevier.com/reaxys)
Elsevier.com

Reaxys Contents Integration: Reaxysを合成研究者の情報ポータルに

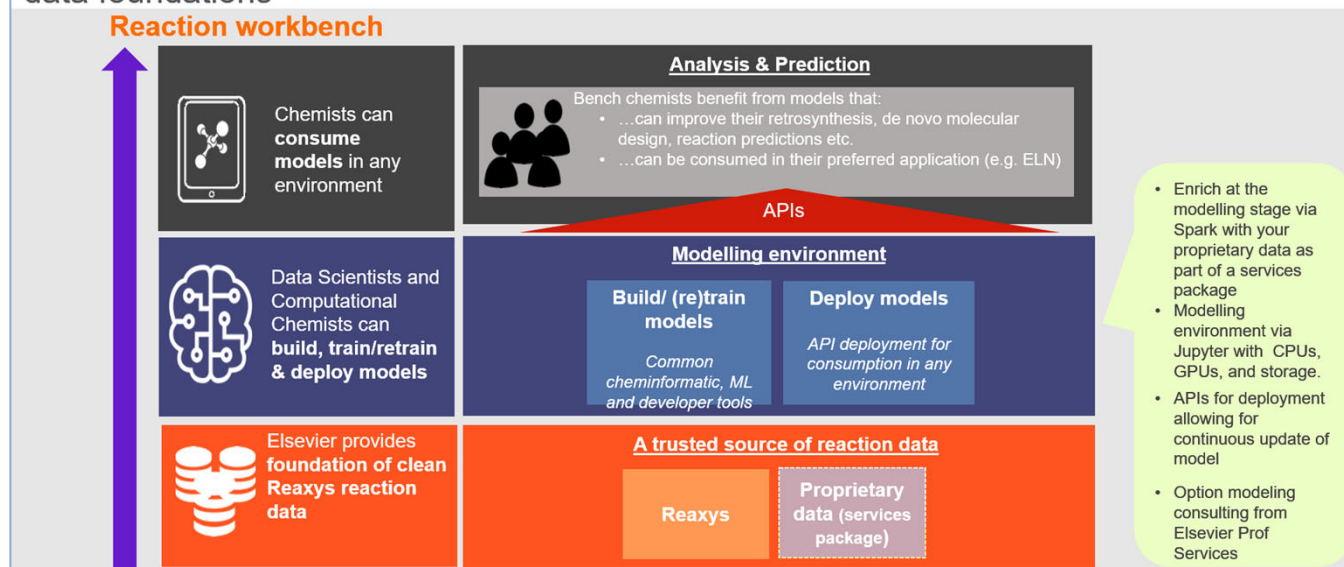


専用のReaxys環境を構築

自社内の化学系情報(反応・試薬など)を
Reaxys上で統合参照することで

-  検索の効率化と効果的な情報収集
-  シンプルで合理的なワークフローの確立
-  容易なコスト管理
-  単純作業の軽減と時間の有効活用

Entellect's Reaction Workbench: Better predictive reaction chemistry from Reaxys' solid data foundations



お問い合わせ先：

〒106-0044 東京都港区東麻布 1-9-15 東麻布一丁目ビル4階

E-mail: jp.corporate@elsevier.com

<https://www.elsevier.com/ja-jp>



**「化学データサイエンスおよび人工知能討論、勉強会」立ち上げ会：
計算毒性学研究会主催**
**“Chemical Data Science and Artificial Intelligence Discussion, Work Shop”
Kick-off Meeting:**
Organized by the Computational Toxicology Study Group

開催趣旨：

データサイエンスや人工知能関連技術は化合物を中心とした多種多様な分野でも適用が拡大している。化合物を中心とした関連分野は化合物全般に及ぶだけでなく、化合物を利用する様々な分野での適用がされている。医／農薬開発、毒性（生体／生態（環境））予測、物性／機能性化合物開発、動物実験代替法と様々である。また、データサイエンスや人工知能技術は化合物のみならず、種々画像データや機器スペクトルデータ、さらには遺伝子／タンパクデータ等の様々な種類のデータを用いたデータ解析にも重要な役割を果たす。

データサイエンスや人工知能は上記に加えて様々な研究分野に適用可能である。コンピュータの様々な進歩にも支えられて、従来とは次元の異なる成果を提供する可能性がある。

本フォーカストセッションでは、化学分野でのデータサイエンスや人工知能適用技術であるケモメトリックスの研究実施として、機能性化合物等に適用した事例についての発表をいただく。また、創薬分野にデータサイエンスや人工知能を適用した事例に関する情報も発表される。

今回のデータサイエンスや人工知能の急速な発展と適用分野の広がり、CPU 自体の変革を導き出しつつある。自分の PC が「インテル AI 入っている？」となるかもしれない・・・。

モデレーター： 湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta
株式会社インシリコデータ In Silico Data, Ltd.
植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa
明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University
金子 弘昌 Kaneko Hiromasa
明治大学 理工学部 応用化学科

1. 人工知能を活用した分子設計・材料設計

金子 弘昌 Kaneko Hiromasa
明治大学 理工学部 応用化学科
Meiji University Department of Applied Chemistry School of Science and Technology

[データ化学工学研究室（金子研究室）](#)では、医薬品をはじめとして様々な高機能性材料のデータを機械学習等により解析し、その中に隠れている関係性をモデル化し、そのモデルに基づいた未知の化学構造・材料・製品の評価および設計を実施している。本講演では機械学習により高機能性材料の研究・開発を支援する方法を解説し、ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス分野における研究事例について紹介する。

2. はじめての AI 創薬と Elix における事例紹介

結城 伸哉 Shinya Yuki
株式会社 Elix Elix, Inc.

3. 富士通が考えるニューノーマル時代の研究スタイル

古田 一匡 Kazumasa Furuta
富士通株式会社 Fujitsu Ltd.

4. インテルの AI に向けての取り組み

大内山 浩 Hiroshi Ouchiya
インテル株式会社 Intel K.K.

近年、AI の社会実装、事業実装が進み、あらゆる場所でこの新しいテクノロジーの恩恵を受けるようになってきました。インテルは、既に“どこにでもある”インテル CPU の上で皆様が当たり前のように AI を動かすことを追求し続け、日々製品の強化・改良を進めております。本講演ではハードウェア、ソフトウェア、お客様事例を交えてインテルが AI に対してどのような取り組みを行っているかをお話しします。

ペプチド創薬を指向した計算科学の最前線
Frontiers of Computational Science for Peptide Drug Discovery

開催趣旨:

ペプチドを利用した中分子医薬品は、低分子と抗体の利点を併せ持ち、新たな創薬標的の開拓なども期待され、近年、多くの注目を集めている。しかしながら、ペプチドを対象にしたインシリコ創薬の技術は必ずしも十分とは言えず、その開発と応用が喫緊の課題となっている。そこで本セッションでは、計算科学を利用してペプチドに関連する研究を進めている先生方に、最近の研究成果についてご講演頂くと共に、現状の問題点や将来の展望について議論する。

モデレーター: **渡邊 博文 Hirofumi Watanabe** **山岸 賢司 Kenji Yamagishi**
ウィズメーティス WithMetis Co., Ltd. 日本大学 Nihon University

石川 岳志 Takeshi Ishikawa
鹿児島大学 Kagoshima University

1. 溶液中における環状ペプチド分子の前処理付構造予測計算

谷田 義明 Yoshiaki Tanida
富士通研究所 FUJITSU LIMITED

タンパク質間相互作用をターゲットにした創薬では、それらの境界面の形状・大きさのために低分子阻害剤の開発が困難となっている。環状ペプチド分子は、タンパク質の表面に高い親和性と特異性をもって結合することが知られている。しかし、一般に水への溶解性が低く、溶液中で複数の構造をとることが多いため、実験でその構造を明らかにすることが難しい。創薬応用の観点からは、まず溶液中における原子レベルの構造情報が必要である。一方、分子動力学シミュレーションは溶液中での構造解明に対する有効な手段であるが、環状ペプチド分子ではその複雑な多谷ポテンシャルエネルギーに起因した初期構造依存性が存在する。本講演では、格子点にアミノ酸を配置する格子プロテインモデルを専用ハードウェアで解く前処理と拡張アンサンブル法を組み合わせた立体構造予測について述べる。

2. ペプチドの膜透過性を評価する分子シミュレーション技術の創出

原田 隆平 Ryuhei Harada
筑波大学 計算科学研究センター University of Tsukuba

生体膜からペプチドを生体内に取り込み、疾患原因となる標的分子を活性阻害するプロセスにおいて、膜透過性を評価することはペプチド創薬に有益な設計情報を提供する。分子動力学計算(MD)は、膜透過に伴うペプチドの構造変化を詳細に追跡できる。しかしながら、従来のMDにより現実的な計算コストで膜透過を抽出することは難しい。何故ならば、膜透過に要する時間スケールと比較して従来のMDが追跡可能な時間スケールが極めて短いため、膜透過がレアイベントであり、抽出困難だからである。本講演では、発表者が開発したレアイベントサンプリング法である「PaCS-MD」と「OFLOOD」の併用により現実的な計算コストでペプチドを膜透過させ、膜透過に伴う自由エネルギープロファイルを見積もる計算手法について述べる。

3. ドッキング計算を利用したヒト主要組織適合抗原とペプチドの結合親和性計算法の開発

石川 岳志 Takeshi Ishikawa
鹿児島大学 理工学研究科 Kagoshima University

外来微生物由来のペプチド断片(エピトープ)を、ヒト主要組織適合抗原(MHC)クラス I 分子が結合し、T細胞に抗原提示することは、免疫応答の初期段階における重要なプロセスの一つである。ヒトには3種類のMHCクラス I 分子の遺伝子が存在し(HLA-A,B,C)、これらは多型性に富んでおり数多くのアレルが確認されている。従って、我々が保有するMHCクラス I 分子の組み合わせは非常に多様なものとなる。外来微生物のアミノ酸配列から、MHCクラス I 分子に強く結合する配列をアレルごとに決定できれば、抗原提示に利用されるエピトープの配列を特定することが可能となり、効果の高いワクチン開発への道も開かれる。本講演では、MHCクラス I 分子とペプチドとの結合親和性を、アレルごとに予測する計算手法の開発について述べる。