

# 第 48 回構造活性相関シンポジウム

## 概要

日時：2020 年 12 月 10 日（木）・11 日（金）

会場：オンライン開催

主催：日本薬学会構造活性相関部会

協賛：情報計算化学生物学会、日本化学会、日本農薬学会

後援：日本農芸化学会

企業協賛：株式会社 Elix、日本曹達株式会社

企業展示：富士通株式会社、株式会社 Elix、株式会社アフィニティサイエンス、  
株式会社モルシス、シュレーディングー株式会社

## プログラム

### 第 1 日目 12 月 10 日（木）

9:00-9:30 Zoom Webinar 開場

9:30-9:40 開会式

9:40-10:30 招待講演

座長：広川貴次（産業技術総合研究所）

座長補佐：大田雅照（理化学研究所）

KI-01 化学空間や配座空間をより自由に探索するために：様々な機械学習・最適化手法とシミュレーションの連携

寺山 慧（横浜市立大学 生命医科学研究科 准教授）

10:30-11:50 口頭発表

座長：田上宇乃（味の素株式会社）

座長補佐：河合健太郎（摂南大学）

KO-01 計算デザイン Supercharging 抗体の物性機能解析

○笠原慶亮<sup>1</sup>、黒田大祐<sup>1,2,3</sup>、河出来時<sup>1</sup>、田部亜季<sup>1</sup>、長門石暁<sup>4</sup>、津本浩平<sup>1,2,3,4</sup>（<sup>1</sup> 東大院工・バイオエンジ、<sup>2</sup> 東大院・工・医工、<sup>3</sup> 東大院・工・化生、<sup>4</sup> 東大・医科研）

KO-02 クライオ電子顕微鏡による中低分子の微小結晶構造解析

○高場圭章、眞木（米倉）さおり、米倉功治（理化学研究所放射光科学研究センター）

座長：赤松美紀（岡山大学）

座長補佐：植薄信也（日本曹達株式会社）

- KO-03 農薬およびその代謝物等に対する変異原性 Ames インシニコ評価  
○古濱彩子<sup>1</sup>、清家伸康<sup>2</sup>、小野敦<sup>3</sup>（<sup>1</sup>国立医薬品食品衛生研究所変異遺伝部、<sup>2</sup>農業・食品産業技術総合研究機構農業環境変動研究センター、<sup>3</sup>岡山大学医歯薬学総合研究科）
- KO-04 QSAR Regression and Classification Models for Toxicity of Phenols to *Tetrahymena pyriformis*. An Electronic-Structure Informatics Study  
○Algafari Bakti Manggara<sup>1</sup>, Manabu Sugimoto<sup>2</sup>（<sup>1</sup>熊本大院自然科学、<sup>2</sup>熊本大院先端科学）

11:50-13:00 昼休憩、Remo ポスター会場開場（11:30-16:30）

12:30-13:00 株式会社 Elix ランチョンセミナー

13:00-13:40 ポスター発表 ショートプレゼンテーション（各1分）

13:40-14:00 ポスター発表の進め方について

14:00-15:00 ポスター発表（奇数番号）

15:00-16:00 ポスター発表（偶数番号）

16:00-16:10 休憩

16:10-17:50 口頭発表

座長：本間光貴（理化学研究所）

座長補佐：浴本亨（横浜市立大学）

- KO-05 任意の化合物を入力とし評価指標に基づき最適化する機械学習手法の開発  
○恵利川大樹、安尾信明、関嶋政和（東京工業大学）
- KO-06 幾何学的相互作用解析と機械学習による抗原-抗体複合体側鎖モデル構造妥当性予測  
○千葉峻太郎<sup>1</sup>、小甲裕一<sup>2</sup>、野沢優翼<sup>2</sup>、柳田駿介<sup>2</sup>、佐藤美和<sup>2</sup>、池口満徳<sup>1,3</sup>、大田雅照<sup>1</sup>（<sup>1</sup>理研・MIH、<sup>2</sup>三井情報、<sup>3</sup>横浜市大・生命医科研）
- KO-07 In silico による PROTAC を介した三元複合体モデリング  
○神谷謙太郎<sup>1</sup>、池上貴史<sup>1</sup>、片岡良一<sup>1</sup>、Michael Drummond<sup>2</sup>、Nadia Li<sup>2</sup>、Chris Williams<sup>2</sup>、Andrew Henry<sup>2</sup>（<sup>1</sup>株式会社モルシス ライフサイエンス部、<sup>2</sup>Chemical Computing Group ULC）

座長：川下理日人（近畿大学）

座長補佐：中村真也（近畿大学）

**KO-08** 新型コロナウイルスによるパンデミックに対する FMO DB の取り組み

○渡邊千鶴<sup>1,2</sup>、神坂紀久子<sup>1</sup>、大山達也<sup>1</sup>、高谷大輔<sup>1</sup>、加藤幸一郎<sup>3</sup>、川嶋裕介<sup>4</sup>、半田佑磨<sup>4</sup>、山本亜美<sup>4</sup>、渡邊一樹<sup>5</sup>、福澤薫<sup>4</sup>、本間光貴<sup>1</sup>（<sup>1</sup>理研、<sup>2</sup>JST さきがけ、<sup>3</sup>九大院工、<sup>4</sup>星薬大、<sup>5</sup>阪大院薬）

**KO-09** タンパク質のアミノ酸残基間の IFIE に関する機械学習

○畑田峻<sup>1</sup>、八幡研一郎<sup>1</sup>、藤本真悠<sup>1</sup>、奥脇弘次<sup>1</sup>、田中成典<sup>2</sup>、古明地勇人<sup>3</sup>、福澤薫<sup>4,5</sup>、望月祐志<sup>1,5</sup>（<sup>1</sup>立教大理、<sup>2</sup>神戸大院シス情、<sup>3</sup>産総研、<sup>4</sup>星薬科大、<sup>5</sup>東大生研）

17:50-18:10 懇親会の進め方について

18:10-19:30 懇親会

## 第2日目 12月11日(金)

9:30-10:20 招待講演

座長：福澤薫（星薬科大学）

座長補佐：杉本学（熊本大学）

KI-02 量子化学計算と機械学習の創薬研究への応用

原田俊幸（住友化学株式会社 健康・農業関連事業研究所 主任研究員）

10:20-11:20 口頭発表

座長：服部一成（塩野義製薬株式会社）

座長補佐：永田尚也（大日本住友製薬株式会社）

KO-10 医薬候補化合物自動設計装置—構造活性相関研究における遡及検証および実践運用—

○石原司<sup>1</sup>、古賀浩伸<sup>1</sup>、池野巧<sup>2</sup>（<sup>1</sup>産業技術総合研究所、<sup>2</sup>田辺三菱製薬株式会社）

KO-11 インテグリン  $\alpha$ IIb $\beta$ 3 阻害剤の効率的なインシリコスクリーニング方法の探索

○河合健太郎<sup>1</sup>、友納菜美<sup>1</sup>、町田由愛<sup>1</sup>、軽尾友紀子<sup>1</sup>、樽井敦<sup>1</sup>、佐藤和之<sup>1</sup>、池田幸樹<sup>2</sup>、木梨達雄<sup>2</sup>、表雅章<sup>1</sup>（<sup>1</sup>摂南大学薬学部、<sup>2</sup>関西医科大学生命医学研究所）

座長：中川好秋（京都大学）

座長補佐：加藤博明（広島商船高等専門学校）

KO-12 農業生物資源データベース～構造活性相関研究への利用可能性について～

○前田美紀、服部幸子、大園麻友、山崎福容、竹谷勝（農研機構・遺伝資源センター）

11:20-12:10 招待講演

座長：関嶋政和（東京工業大学）

座長補佐：飯島洋（日本大学）

KI-03 スパコンを用いたタンパク質—化合物結合親和性の高精度予測と医療・創薬への応用

荒木望嗣（京都大学大学院 医学研究科 特定准教授）

12:10-13:10 昼休憩

13:10-14:00 パネルディスカッション「活性予測コンテスト開催に向けて」

飯島洋（日本大学）、杉本学（熊本大学）、関嶋政和（東京工業大学）、  
広川貴次（産業技術総合研究所）、福澤薫（星薬科大学）、  
本間光貴（理化学研究所）

14:00-14:20 SAR Award 表彰式・閉会式

## ポスター

1日目 奇数番号 14:00-15:00 偶数番号 15:00-16:00

### 【1. 生理活性物質の活性評価・構造展開・医農薬への応用】

- KP-01 COMT/阻害剤複合体の結晶構造解析及び、量子化学計算による相互作用解析  
○武部克希<sup>1</sup>、福澤薫<sup>2</sup>、鈴木守<sup>3</sup>、楠瀬隆生<sup>4</sup>、鶴澤成一<sup>1</sup>、飯島洋<sup>5</sup> (1大阪大学歯学部歯学研究科口腔外科第二教室、2星薬科大学 薬学部 薬品物理化学研究室、3大阪大学蛋白質研究所、4 日本大学松戸歯学部、5 日本大学薬学部生物有機化学研究室)

### 【2. 基本パラメータ・基本手法・情報数理的アプローチ】

- KP-02 ディープラーニングを用いたタンパク質水和分布予測法の研究  
河間光祐<sup>1</sup>、○吉留崇<sup>1</sup>、池口満徳<sup>2,3</sup>、大田雅照<sup>3</sup> (1東北大院工、2横浜市大生命医科学、3理研)
- KP-03 深層学習を用いた各種能動学習法による Nav1.7 阻害活性予測性能改善速度の比較  
○佐藤朋広、大田雅照、本間光貴 (理化学研究所)

### 【3. 吸収・分布・代謝・毒性・環境毒性】

- KP-04 ランダムフォレストによる予測値の分散を活用した魚類急性毒性予測モデルの構築  
○城島光司、赤堀有美、宮浦英樹 (一般財団法人化学物質評価研究機構安全性評価技術研究所)
- KP-05 L-isoAsp/D-Asp 含有ペプチドに対する酵素 PIMT の基質認識機構の解析  
○仲吉朝希<sup>1</sup>、加藤紘一<sup>1,2</sup>、高橋央宜<sup>3</sup>、栗本英治<sup>1</sup>、小田彰史<sup>1,4</sup> (1名城大院薬、2金城学院大薬、3東北医薬大薬、4阪大蛋白研)

### 【4. in silico 技術 (薬物-受容体相互作用計算、仮想スクリーニングなど)】

- KP-06 結合ポーズの正確性と結合ポーズによる相互作用パターンの解析  
○加藤俊輝、河合健太郎、佐藤和之、樽井敦、軽尾友紀子、表雅章 (摂南大学薬学部)
- KP-07 FMO 法に基づく相互作用記述子を用いた p38 MAP キナーゼの阻害剤活性予測  
○神坂 紀久子<sup>1</sup>、渡邊 千鶴<sup>1</sup>、高谷 大輔<sup>1</sup>、原田 俊幸<sup>1,2</sup>、佐藤 朋広<sup>1</sup>、幸 瞳<sup>1</sup>、本間 光貴<sup>1</sup> (1理化学研究所、2住友化学株式会社)

- KP-08 パターン認識による低分子とタンパク質間相互作用解析を基づくドッキング手法の開発  
○HUANG Yuxiang (立命館大学生命科学部)
- KP-09 Asn-Ile 配列における Asn 残基の非酵素的 C 末端側ペプチド結合切断機構の解析  
○加藤絢一<sup>1,2</sup>、仲吉朝希<sup>2</sup>、栗本英治<sup>2</sup>、小田彰史<sup>2,3</sup> (1金城学院大学薬学部、<sup>2</sup>名城大学薬学部、<sup>3</sup>大阪大学蛋白質研究所)
- KP-10 14-3-3 と阻害剤の相互作用解析  
○富士寛文<sup>1</sup>、川下理日人<sup>2</sup> (1近畿大院総合理工、<sup>2</sup>近畿大理工)
- KP-11 フラグメント分子軌道法による AKR1B10 複合体の相互作用解析  
○吉本耀<sup>1</sup>、川下理日人<sup>2</sup> (1近畿大院総合理工、<sup>2</sup>近畿大理工)
- KP-12 フラグメント分子軌道法によるエボラウイルス VP35 と阻害剤との相互作用解析  
○原田一真、川下理日人 (近畿大理工)
- KP-13 ニューロトロフィン受容体 TrkAd5 と結合ペプチド間の相互作用様式の解明  
○高橋真帆<sup>1</sup>、浴本亨<sup>1</sup>、鈴木里佳<sup>1</sup>、山根努<sup>2</sup>、高橋栄夫<sup>1</sup>、池口満徳<sup>1,2</sup> (1横浜市大・生命医、<sup>2</sup>理化学研究所・MIH)
- KP-14 フラグメント分子軌道法による XIAP と阻害剤の相互作用解析  
○室谷百香、川下理日人 (近畿大理工)
- KP-15 PLS 回帰を用いた HIV-1 gp120 と抗体 17b の相互作用解析  
○岡山友樹、川下理日人 (近畿大理工)
- KP-16 フラグメント分子軌道法を用いた HEL/HyHEL-10 相互作用解析  
○宮嶋起徳、川下理日人 (近畿大理工)
- KP-17 QSAR 及びドッキングスタディを用いた抗コリン作用による LUTS のリスク予測  
○湯山円晴<sup>1</sup>、伊東岳<sup>1</sup>、荒井裕美子<sup>1</sup>、金谷貴行<sup>1</sup>、百瀬泰行<sup>1</sup>、栗原正明<sup>1,2</sup> (1国際医療福祉大学薬学部、<sup>2</sup>国立衛研)
- KP-18 膨大なケミカルスペースに対するファーマコフォアに基づく高速類似構造探索  
○片岡良一<sup>1</sup>、池上貴史<sup>1</sup>、甘利真司<sup>1</sup>、Raphael Klein<sup>2</sup>、Marcus Gastreich<sup>2</sup> (1株式会社モルシス ライフサイエンス部、<sup>2</sup>BioSolveIT GmbH)
- KP-19 FMO 計算を用いた SARS-CoV-2 の RBD-中和抗体間の相互作用解析  
○渡邊一樹<sup>1</sup>、川嶋裕介<sup>2</sup>、福澤薫<sup>2</sup>、渡邊千鶴<sup>3,4</sup>、本間光貴<sup>3</sup>、田雨時<sup>1</sup>、川下理日人<sup>5</sup>、高木達也<sup>1</sup> (1阪大院薬、<sup>2</sup>星薬大、<sup>3</sup>理研、<sup>4</sup>JST さきがけ、<sup>5</sup>近大理工)
- KP-20 MOEsaic を用いたリガンドベース設計におけるマルチパラメータの最適化  
○池上貴史<sup>1</sup>、神谷謙太郎<sup>1</sup>、木村嘉朗<sup>1</sup>、片岡良一<sup>1</sup>、Cristian Tibirna<sup>2</sup>、Frederick Parsons<sup>2</sup>、Olivier Gagnon<sup>2</sup>、Paul Pillot<sup>2</sup>、Al Ajamian<sup>2</sup>、Paul Labute<sup>2</sup> (1株式会社モルシス ライフサイエンス部、<sup>2</sup>Chemical Computing Group ULC)

- KP-21 中分子シクロスポリン A とシクロスポリン E の 分子ダイナミクスの比較  
○伊藤朱里<sup>1</sup>、浴本亨<sup>1</sup>、山根努<sup>2</sup>、池口満徳<sup>1,2</sup> (1横浜市大・生命医、<sup>2</sup>理化学研究所・MIH)
- KP-22 分子動力学計算によるコロナチン立体異性体の受容体サブタイプ選択性解析  
○加治拓哉<sup>1</sup>、齋藤大明<sup>2</sup>、林謙吾<sup>1</sup>、野本春菜<sup>1</sup>、中山美涼<sup>1</sup>、加藤信樹<sup>1</sup>、高岡洋輔<sup>1</sup>、上田実<sup>1,3</sup> (1東北大学大学院理学系研究科、<sup>2</sup>北陸大学薬学部、<sup>3</sup>東北大学大学院生命科学研究科)
- KP-23 フラグメント分子軌道法による SARS-CoV-2 Mpro と阻害剤の相互作用解析  
○川嶋裕介<sup>1</sup>、半田佑磨<sup>1</sup>、奥脇弘次<sup>2</sup>、望月祐志<sup>2</sup>、古明地勇人<sup>3</sup>、田中成典<sup>4</sup>、渡邊千鶴<sup>5</sup>、本間光貴<sup>5</sup>、福澤薫<sup>1</sup> (1星薬科大、<sup>2</sup>立教大理学部、<sup>3</sup>産業技術総合研究所、<sup>4</sup>神戸大学大学院システム情報学研究科、<sup>5</sup>理化学研究所)
- KP-24 MDM2 と阻害剤のフラグメント分子軌道法を用いた相互作用解析  
○板東竜也、川下理日人 (近畿大理工)

#### 【5. バイオインフォマティクス】

- KP-25 タンパク質複合体立体構造予測における Quality 評価法の予測精度の比較検証  
○原田祥季、清田泰臣、竹田一志鷹真由子 (北里大学薬学部)

#### 【6. 分子情報処理（データベースを含む）・データ予測】

- KP-26 分子行列の固有ベクトルを用いた構造類似性評価  
○若栗佳介<sup>1,2</sup>、高橋由雅<sup>3</sup>、金谷重彦<sup>1</sup> (1奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科、<sup>2</sup>新潟薬科大学応用生命科学部、<sup>3</sup>豊橋技術科学大学情報・知能工学系)
- KP-27 データ解析、AI におけるネガティブデータの重要性：化学反応、薬理活性、毒性、他  
○湯田浩太郎<sup>1</sup>、岩渕好治<sup>2</sup> (1インシリコデータ、<sup>2</sup>東北大院薬学)
- KP-28 Imputation と Prediction の比較、および、創薬への適用  
Matthew Segall<sup>1</sup>、○田島澄恵<sup>2</sup>、Benedict Irwin<sup>1</sup>、Thomas Whitehead<sup>3</sup>、Gareth Conduit<sup>3,4</sup> (1Optibrium Ltd.、<sup>2</sup>株式会社ヒューリンクス、<sup>3</sup>Intellegens Ltd.、<sup>4</sup>Cavendish Laboratory University of Cambridge)
- KP-29 機械学習を用いた 3D-RISM ベースの結合自由エネルギー予測  
○大崎和<sup>1</sup>、浴本亨<sup>1</sup>、山根努<sup>2</sup>、池口満徳<sup>1,2</sup> (1横浜市大・生命医、<sup>2</sup>理研・MIH)
- KP-30 タンパク質立体構造データベースシステム PSILO による SBDD の効率化  
○東田欣也 (株式会社モルシス)

#### 【7. その他】

- KP-31 シクロスポリン A の CHARMM 力場の開発  
○山根努<sup>1</sup>、浴本亨<sup>2</sup>、池口満徳<sup>1,2</sup> (1理研 MIH、<sup>2</sup>横浜市大院)