

## 第 50 回構造活性相関シンポジウム プログラム

1 日目：11 月 10 日（木）

9:00-9:30 開場

9:30-9:40 開会式（Zoom）

9:40-10:10 第 50 回記念講演（Zoom）

座長：竹田－志鷹真由子（北里大学）

座長（Zoom 担当）：仲吉朝希（広島市立大学）

KC01 シミュレーションとインフォマティクスによる医薬品設計研究 再び定量的予測へ  
本間光貴（日本薬学会構造活性相関部会長）（理化学研究所）

10:10-10:20 休憩

10:20-11:20 口頭発表（KO01－KO03）（Zoom） 発表 15 分・質疑応答 5 分

座長：遠藤智史（岐阜薬科大学）

座長（Zoom 担当）：渡邊友里江（昭和大学）

KO-01 テンソル分解を用いた新型コロナウイルス変異株に関する MD-FMO 連携解析

○秋澤和輝<sup>1</sup>、北原駿<sup>1</sup>、太刀野雄介<sup>1</sup>、土居英男<sup>1</sup>、辻本鷹介<sup>1</sup>、畑田峻<sup>1</sup>、奥脇弘次<sup>1</sup>、山本詠士<sup>2</sup>、平野秀典<sup>2</sup>、泰岡顕治<sup>2</sup>、田中成典<sup>3</sup>、望月祐志<sup>1,4</sup>（<sup>1</sup>立教大学理学部、<sup>2</sup>慶応大学理工学部、<sup>3</sup>神戸大学大学院システム情報学研究科、<sup>4</sup>東京大学生産技術研究所）

KO-02 粗視化セグメント間の相互作用エネルギーの機械学習による推定

○松岡壮太<sup>1</sup>、奥脇弘次<sup>1</sup>、土居英男<sup>1</sup>、南聡次朗<sup>1</sup>、栖原涼輔<sup>1</sup>、望月祐志<sup>1,2</sup>（<sup>1</sup>立教大学理学部、<sup>2</sup>東京大学生産技術研究所）

KO-03 強化学習に基づく分子生成手法を用いたキナーゼ選択的阻害剤の設計

○吉澤竜哉<sup>1</sup>、石田祥一<sup>1</sup>、佐藤朋広<sup>2</sup>、大田雅照<sup>3</sup>、本間光貴<sup>2</sup>、寺山慧<sup>1</sup>（<sup>1</sup>横浜市立大学 生命医科学研究科、<sup>2</sup>理化学研究所 生命機能科学研究センター、<sup>3</sup>理化学研究所 計算科学研究センター HPC/AI 駆動型医薬プラットフォーム）

11:20-11:30 休憩

11:30-12:20 招待講演（Zoom）

座長：加藤紘一（湘南医療大学）

座長（Zoom 担当）：渡邊友里江（昭和大学）

- KI-01 核内受容体に作用する薬物分子の創製  
栗原正明 (湘南医療大学薬学部)
- 12:20-13:20 昼休憩
- 12:25-13:20 ランチョンセミナー (Zoom)
- 12:25-12:50 SMILES 言語モデル SmilesFormer の開発とその応用例  
株式会社 Elix
- 12:55-13:20 巨大ケミカルスペース超高速探索ツール infiniSee の紹介  
株式会社モルシス
- 13:20-13:40 ポスター発表 ショートプレゼンテーション (各1分) (Zoom)
- 13:40-15:10 ポスター発表 (KP01 - KP13) (oVice)
- KP-01 DPP8阻害剤のフラグメントベースバーチャルスクリーニング  
○小澤新一郎、彌田桃香、佐々木瑠梨、田中信忠 (北里大学薬学部)
- KP-02 バーチャルスクリーニングのための既知フラグメント化合物-結合サイトデータベースの構築  
○山乙教之、木村亮祐、田中信忠 (北里大学薬学部)
- KP-03 インシリコスクリーニング(LBDD)のための最近のフィンガープリントの性能検討  
○高谷大輔、田雨時、福澤薫 (阪大薬)
- KP-04 QSARによる危険ドラッグのインシリコ活性予測  
○荒井裕美子<sup>1</sup>、湯山円晴<sup>1</sup>、市丸嘉<sup>2</sup>、佐藤忠章<sup>1</sup>、栗原正明<sup>2</sup> (<sup>1</sup>国際医療福祉大学大学院、<sup>2</sup>湘南医療大学薬学部)
- KP-05 薬物動態学的増強因子としての新規ベンジルオキシフェニルイミダゾール誘導体の創製と構造活性相関  
尾崎舞、○河合健太郎、軽尾友紀子、樽井敦、佐藤和之、山下伸二、片岡誠、表雅章 (摂南大学薬学部)
- KP-06 エポキシドを導入したインディルビン誘導体Epoxy/Indの抗がん活性に関する構造活性相関  
○市丸嘉<sup>1</sup>、加藤紘一<sup>1</sup>、栗原正明<sup>1</sup>、宮入伸一<sup>2</sup> (<sup>1</sup>湘南医療大学薬学部、<sup>2</sup>日本大学薬学部)
- KP-07 水和サイト解析を用いたEZH2-EED PPI阻害剤のバーチャルスクリーニング  
○吉田智喜、松下紀梨、田中信忠 (北里大学薬学部)
- KP-08 ヴァーチャルライブラリーを用いたタンパク質-タンパク質阻害と膜透過性を考慮

した中分子ライブラリー構築

○米澤朋起<sup>1</sup>、池田和由<sup>1,2</sup>、大澤匡範<sup>1</sup>、大田雅照<sup>2</sup>、本間光貴<sup>2</sup> (<sup>1</sup>慶應義塾大学薬学部、<sup>2</sup>理化学研究所)

KP-09 短時間MDシミュレーションによるリガンド-タンパク質間結合親和性推定手法の検討

○星野小百合<sup>1</sup>、石田祥一<sup>2</sup>、河東田道夫<sup>3</sup>、隅田真人<sup>4</sup>、奥野恭史<sup>5</sup>、寺山慧<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>横浜市大理、<sup>2</sup>横浜市大院生命医、<sup>3</sup>高度情報科学技術研究機構、<sup>4</sup>理研 AIP、<sup>5</sup>京都大院医)

KP-10 FMO法を用いたSARS-CoV-2メインプロテアーゼ-阻害薬S-217622結合メカニズムの解明

○渡邊千鶴<sup>1</sup>、田中成典<sup>2</sup>、沖山佳生<sup>3</sup>、大山達也<sup>4</sup>、神坂紀久子<sup>1</sup>、幸瞳<sup>1</sup>、高谷大輔<sup>5</sup>、福澤薫<sup>5</sup>、本間光貴<sup>1</sup> (<sup>1</sup>理研 BDR、<sup>2</sup>神大シス情、<sup>3</sup>国立衛研、<sup>4</sup>甲南大 FIBER、<sup>5</sup>阪大薬)

KP-11 Asn-Gly配列およびAsn-Ile配列におけるAsn残基脱アミド化の比較

○加藤紘一<sup>1</sup>、仲吉朝希<sup>2</sup>、栗本英治<sup>3</sup>、小田彰史<sup>3</sup>、石川吉伸<sup>1</sup> (<sup>1</sup>湘南医療大学薬学部、<sup>2</sup>広島市立大学大学院情報科学研究科、<sup>3</sup>名城大学薬学部)

KP-12 膜水系における人工イオンチャネルのQM/MMシミュレーション

○中川真由子<sup>1</sup>、浴本亨<sup>1</sup>、山根努<sup>2</sup>、佐藤浩平<sup>3</sup>、金原数<sup>3</sup>、池口満徳<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>横浜市立大学生命医科学研究科、<sup>2</sup>理化学研究所 計算科学研究センター、<sup>3</sup>東京工業大学生命理工学院)

KP-13 アミノ酸トランスポーターLAT1の基質輸送シミュレーション

○吉田夏海<sup>1</sup>、浴本亨<sup>1</sup>、山根努<sup>2</sup>、池口満徳<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>横浜市立大学生命医科学研究科、<sup>2</sup>理化学研究所 計算科学研究センター)

15:10-15:20 休憩

15:20-17:00 口頭発表 (KO04 — KO08) (Zoom) 発表 15 分・質疑応答 5 分  
座長：原田俊幸 (住友化学)  
座長 (Zoom 担当)：渡邊千鶴 (理化学研究所)

KO-04 インシリコスクリーニングとCADDによる抗COVID-19治療薬候補化合物の探索研究

○辻一徳 (分子機能研究所)

KO-05 シトクロムcの複合体形成過程の分子動力的研究

○下山紘充、重田育照 (筑波大学計算科学研究センター 生命物理科学研究室)

KO-06 FMO-based Technique for Antiviral Drug Discovery and Design

○Kowit Hengphasatporn、重田育照 (筑波大学計算科学研究センター)

座長：高谷大輔（大阪大学）

座長（Zoom 担当）：武部克希（大阪大学）

KO-07 NMRデータを組み入れた抗糖鎖抗体のドッキングシミュレーション

○大野詩歩<sup>1</sup>、大内陽翔<sup>1</sup>、齋藤祐希<sup>1</sup>、真鍋法義<sup>1</sup>、湯浅徳行<sup>2</sup>、松崎祐二<sup>2</sup>、築地信<sup>3</sup>、川寄敏祐<sup>4</sup>、山口芳樹<sup>1</sup>（<sup>1</sup>東北医科薬科大学薬学部、<sup>2</sup>東京化成工業、<sup>3</sup>星薬科大学薬学部、<sup>4</sup>立命館大学薬学部）

KO-08 ヘムタンパク質におけるヘム結合ポケットの構造とタンパク質機能の相関の解析

○近藤寛子<sup>1</sup>、飯塚博幸<sup>2</sup>、舛本現<sup>3</sup>、蒲谷祐一<sup>1</sup>、兼松佑典<sup>4</sup>、鷹野優<sup>5</sup>（<sup>1</sup>北見工大工、<sup>2</sup>北大院情報、<sup>3</sup>理研情シス、<sup>4</sup>広大院先進理工、<sup>5</sup>広市大院情報）

17:00-17:10 休憩

17:10-18:00 招待講演（Zoom）

座長：鷹野優（広島市立大学）

座長（Zoom 担当）：近藤寛子（北見工業大学）

KI-02 加齢に応じて進行するアミノ酸残基異性化と分離分析手法の現状

高田 匠（京都大学複合原子力科学研究所）

18:00-19:30 情報交換会（oVice）

2日目：11月11日（金）

9:00-9:30 開場

9:30-10:00 特別講演（Zoom）

座長：服部一成（塩野義製薬株式会社）

座長（Zoom担当）：吉田智喜（北里大学）

KS-01 COVID-19 経口治療薬 Ensitrelvir (S-217622) の創製  
立花裕樹（塩野義製薬株式会社）

10:00-10:10 休憩

10:10-11:10 口頭発表（KO09 — KO11）（Zoom） 発表 15 分・質疑応答 5 分  
座長：加藤幸一郎（九州大学）  
座長（Zoom担当）：早川大地（昭和大学）

KO-09 自律型化学研究の提案と自律型創薬に関する考察

○湯田浩太郎（株式会社インシリコデータ）

KO-10 化合物の膜透過プロセスを紐解く自由エネルギー計算手法の開発

○原田隆平、森田陸離、重田育照（筑波大学計算科学研究センター）

KO-11 脂質二重膜を考慮した膜タンパク質に対するドッキング手法の開発

○森田陸離、重田育照、原田隆平（筑波大学計算科学研究センター）

11:10-11:20 休憩

11:20-12:10 招待講演（Zoom）

座長：小田彰史（名城大学）

座長（Zoom担当）：福吉修一（金沢大学）

KI-03 進化・創発と AI

伊庭斉志（東京大学大学院情報理工学系研究科）

12:10-13:10 昼休憩

13:10-13:30 ポスター発表 ショートプレゼンテーション（各 1 分）（Zoom）

13:30-15:00 ポスター発表（KP14 — KP27）（oVice）

KP-14 Reverse Fingerprint: 構造モチーフ検出とファーマコフォアクエリ生成への応用

○池上貴史<sup>1</sup>、木村嘉朗<sup>1</sup>、Chris Williams<sup>2</sup>（<sup>1</sup>モルシス、<sup>2</sup>Chemical Computing Group）

- KP-15 歯周病菌由来PgDPP11に対する、阻害剤SH5及びNPPBのin silico相互作用解析  
○渡邊友里江、早川大地、合田浩明（昭和大学薬学部）
- KP-16 フラグメント分子軌道法を用いたIL-6と抗体間の相互作用解析  
○伊丹すず<sup>1</sup>、川下理日人<sup>2</sup>（<sup>1</sup>近畿大学理工学部、<sup>2</sup>近畿大学大学院総合理工学研究科）
- KP-17 フラグメント分子軌道法を用いたBACE1と阻害剤の相互作用解析  
○岡山友樹<sup>1</sup>、川下理日人<sup>1,2</sup>（<sup>1</sup>近畿大学大学院総合理工学研究科、<sup>2</sup>近畿大学理工学部）
- KP-18 フラグメント分子軌道法を用いた安定化剤導入時の14-3-3とパートナータンパク質の相互作用解析  
○宮嶋起徳<sup>1</sup>、上村みどり<sup>2</sup>、川下理日人<sup>1,3</sup>（<sup>1</sup>近畿大学大学院総合理工学研究科、<sup>2</sup>CBI 研究機構量子構造生命科学研究所、<sup>3</sup>近畿大学理工学部）
- KP-19 遺伝子多型がシトクロムP450 2C9の立体構造に与える影響の分子動力学シミュレーションによる解析  
○竹下由里子<sup>1</sup>、仲吉朝希<sup>1,2</sup>、加藤紘一<sup>1,3</sup>、平塚真弘<sup>4</sup>、栗本英治<sup>1</sup>、小田彰史<sup>1,5</sup>（<sup>1</sup>名城大薬、<sup>2</sup>広島市大院情報、<sup>3</sup>湘南医療大薬、<sup>4</sup>東北大院薬、<sup>5</sup>阪大蛋白研）
- KP-20 ランダムフォレスト法を用いたヘムの構造にもとづくヘムタンパク質の機能分類器の作成  
○藤川ひな子<sup>1</sup>、近藤寛子<sup>2</sup>、兼松佑典<sup>3</sup>、鷹野優<sup>1</sup>（<sup>1</sup>広島市立大学大学院情報科学研究科、<sup>2</sup>北見工業大学工学部、<sup>3</sup>広島大学大学院先進理工系科学研究科）
- KP-21 アミロイド $\beta$ においてAsp残基が二次構造変化に与える影響について  
○稲岡顕頌、仲吉朝希、加藤紘一、栗本英治、小田彰史（名城大学薬学部 生物物理化学研究室）
- KP-22 QM/MM MD計算を用いた阻害剤のウレアーゼへの結合機構の解明  
○末永隼也<sup>1</sup>、齋藤徹<sup>2</sup>、鷹野優<sup>2</sup>（<sup>1</sup>広島市立大学情報科学部、<sup>2</sup>広島市立大学大学院情報科学研究科）
- KP-23 計算科学によるSMAD4バリエーションに対する相互作用エネルギーの解析  
○原田一真<sup>1</sup>、板垣あい<sup>1</sup>、川下理日人<sup>1,2</sup>（<sup>1</sup>近畿大学大学院総合理工学研究科、<sup>2</sup>近畿大学理工学部）
- KP-24 機械学習を用いたp38MAPキナーゼの阻害活性予測  
○瀬川颯<sup>1</sup>、川下理日人<sup>1,2</sup>（<sup>1</sup>近畿大学理工学部、<sup>2</sup>近畿大学大学院総合理工学研究科）
- KP-25 交差免疫抗原ワクチンの開発～抗原の予測立体構造  
○関川賢二<sup>1</sup>、宮澤光博<sup>1</sup>、前田美紀<sup>2</sup>（<sup>1</sup>株式会社グリーンバイオメッド、<sup>2</sup>農研機構・資源研）
- KP-26 物理化学パラメータに基づく薬物代謝部位予測

○塩竹悠人、藤谷姫菜、齋藤徹、鷹野優（広島市立大学）

KP-27 Encoder-Decoderモデルの学習過程における化合物構造認識の理解

○根本駿平、水野忠快、楠原洋之（東京大学大学院薬学系研究科）

15:00-15:10 昼休憩

15:10-16:30 口頭発表（KO12 — KO15）（Zoom） 発表 15 分・質疑応答 5 分

座長：千葉峻太郎（理化学研究所）

座長（Zoom 担当）：石田祥一（横浜市立大学）

KO-12 わが国におけるSARS-CoV-2変異株のスパイクタンパクの立体構造の比較

○雨宮三千代（沖中記念成人病研究所）

KO-13 薬物の作用の方向性を考慮した行列分解による作用予測アルゴリズムの開発

○水野忠快、東一織、楠原洋之（東京大学大学院薬学系研究科）

KO-14 量子化学計算により決定した近似関数によるタンパク質鍵穴のハロゲン結合形成可能領域のマッピング法

○早川大地、渡邊友里江、合田浩明（昭和大学薬学部）

KO-15 タンパク質立体構造情報を利用した新規ALS阻害型除草剤の探索

○田中良樹<sup>1</sup>、氏原一哉<sup>2</sup>、坂井直樹<sup>3</sup>、山田悠介<sup>4</sup>、武本瑞貴<sup>2</sup>、森脇寛智<sup>1</sup>、佐藤匡史<sup>1</sup>、JK Stanfield<sup>1</sup>、平田邦生<sup>3</sup>、竹下浩平<sup>3</sup>、引田理英、石谷隆一郎<sup>2</sup>、加藤龍一<sup>4</sup>、千田俊哉<sup>4</sup>、山本雅貴<sup>3</sup>、力丸健太郎<sup>2</sup>、西ヶ谷有輝<sup>1</sup>（<sup>1</sup>株式会社アグロデザイン・スタジオ、<sup>2</sup>株式会社 Preferred Networks、<sup>3</sup>理化学研究所 放射光科学研究センター、<sup>4</sup>高エネルギー加速器研究機構）

16:30-16:40 閉会式（Zoom）

# 協賛企業・出展企業一覧

## ■協賛企業

株式会社エス・ワイ・シー

日本曹達株式会社

## ■ランチョンセミナー

株式会社 Elix

株式会社モルシス

## ■展示企業

OpenEye, Cadence Molecular Sciences

株式会社モルシス

ケモインフォ株式会社

(各五十音順)

本シンポジウムの開催にあたり、公益社団法人日本薬学会ならびに上記の企業より多大なるご支援を賜りました。深く感謝申し上げます。

第 50 回構造活性相関シンポジウム  
実行委員長 小田 彰史