

In Silico 未来型創薬基盤

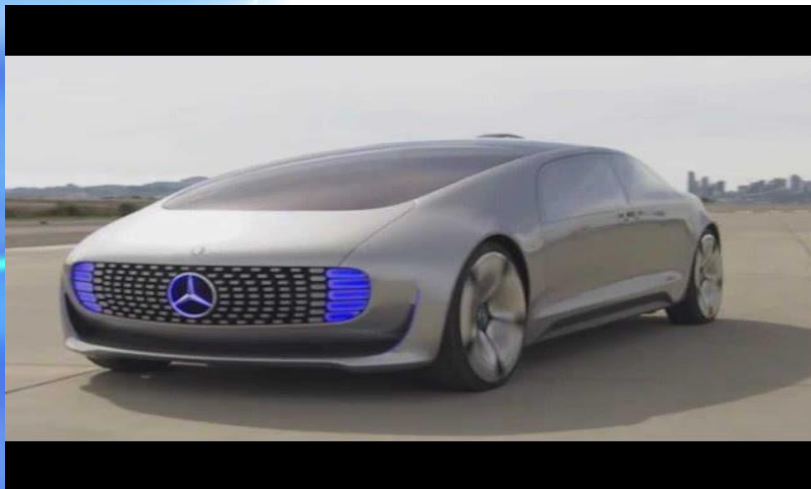
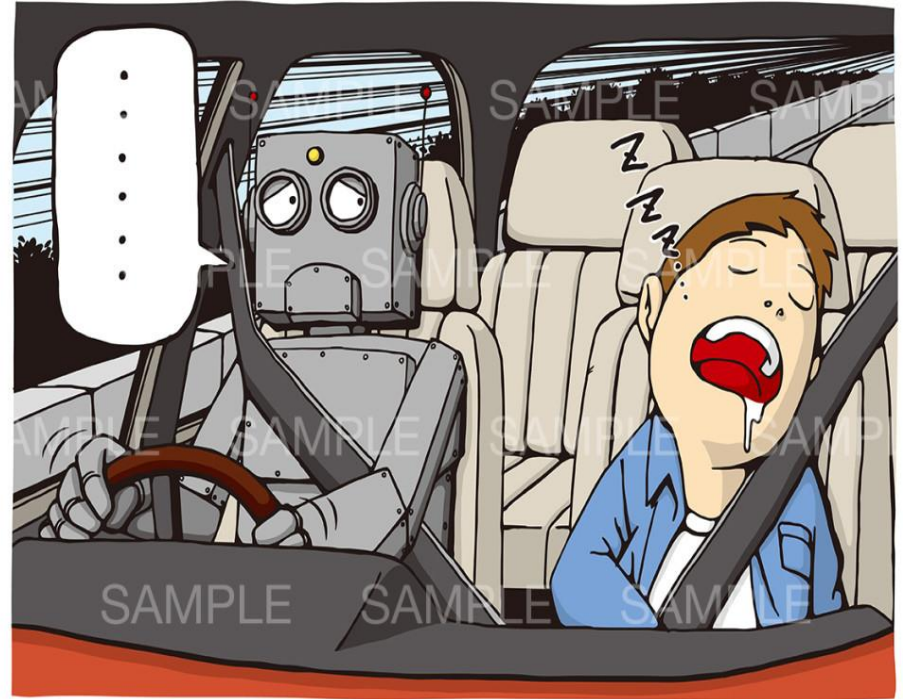
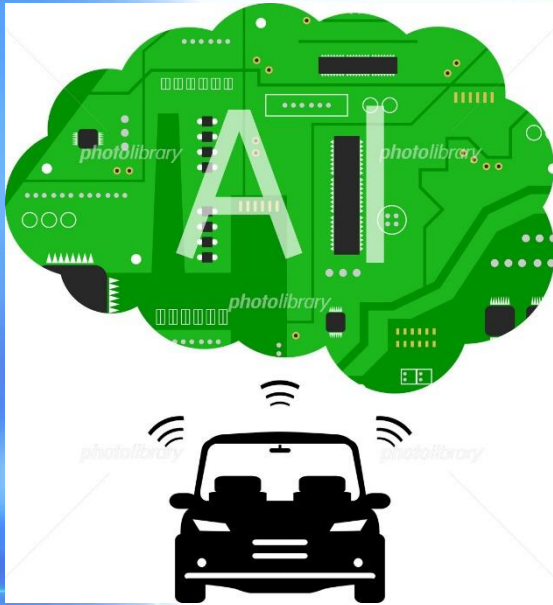
人工知能の統合から合成ロボット、
創薬/医療統合まで

株式会社 インシリコデータ
湯田 浩太郎

本日のプログラム:

1. 自己紹介: 株式会社 インシリコデータ 湯田浩太郎
2. ◇第一の夢 AI(人工知能)関連
 - * 人工知能の歴史(ルールベース型と機械学習型)
 - * 機械学習型人工知能の現状
 - * 近未来型人工知能の形
3. ◇第二の夢 化合物合成関連
 - * 合成関連支援システムと合成ロボット
 - * 近未来型人工知能の形
4. ◇第三の夢 創薬と医療の統合関連
 - * AIによる、高度かつ迅速、正確な治療への展開
 - * 近未来型創薬と医療の形

(近)未来技術：自動運転車



未来技術：空飛ぶ自動車



先端技術：ロボット手術

安全に、
ロボット支援(ダヴィンチ)手術の
拡充を図るために。

ロボット手術センター

http://chuo.kcho.jp/department/special_index/robotic_surgery_center



https://www.tel.co.jp/museum/magazine/medical/121012_topics_02/



<http://www.tosei.or.jp/davinci/davinci.html>

挨拶: 株式会社 インシリコデータ 湯田浩太郎

基礎学習 研究期間

■経歴

1979年3月 東北大学薬学部大学院薬学研究科 薬品合成化学 博士過程終了
博士論文「抗腫瘍性多環式アルカロイドの合成研究」

1979年7月～1981年8月

米国ペンシルバニア州立大学化学科 P.C.Jurs研究室 リサーチアソシエイト
研究テーマ「パターン認識による発癌性予測」

1981年9月 豊橋技術科学大学 第5工学系

研究テーマ: 「NMRデータベースの構築」

1983年12月～2009年6月

富士通株式会社 化学・製薬関連企業研究所の研究システム構築とコンサルタント
2009年7月～2010年3月

(独) 国立環境研究所勤務 安全性予測システム関連業務に従事

2010年5月28日

株式会社 インシリコデータ 設立

取締役社長に就任

適用期間

適用分野

■専門および得意な分野・研究

- ・ 医薬化学 (Medicinal Chemistry)
- ・ 構造-活性相関 (Structure-Activity Relationships)
- ・ 化学多変量解析//パターン認識 (Chemical Multivariate & Pattern Recognition)
- ・ 計算機化学 (Computer Chemistry)
- ・ 計算毒性学 (Computational Toxicology)

富士通勤務時代の業務(1)

1983年から2009年(26年間)

◇コンピューターケミストリー関連業務

■コンピューターケミストリー関連分野での主たる業務

1. 化学関連システムの開発/設計/販売/教育/メンテナンス実施および支援業務
 - ・ CADD (Computer Aided Drug Design) 関連システム構築、教育支援
 - ・ ケモメトリクスおよび構造-活性相関支援システム構築、教育支援
 - ・ 化合物/反応等のデータベースシステム(MACCS/REACCS: 現ISIS)の汎用機への移植
2. データ解析支援業務
 - ・ ADAPT, TSAR, DIWA, SARD, **ADMEWORKS**システムを用いた構造-活性相関解析支援
 - ・ ADAPT, TSAR, **MODELBUILDER**システムを用いたケモメトリクス解析支援
 - ・ TOPKAT, **PREDICTOR**システムを用いた化合物のADME/毒性予測支援
3. コンサルタント関連業務
 - ・ 計算機化学関連一般教育
コンピューターケミストリー全般 (データベース、化合物表記法、他)
 - ・ コンピュータによる構造-活性相関教育/解析実施
Hansch-Fujita法、パターン認識による構造-活性相関、毒性/分解性/代謝予測、
コンビナトリアルケミストリー/HTS全般、インシリコドラグデザイン支援
 - ・ ケモメトリクス教育/解析実施
多変量解析/パターン認識による化学およびバイオ関連データ解析
4. 情報収集業務
 - ・ コンピューターケミストリー、化学関連データ解析の全般的情報収集
 - ・ 富士通製品の競合製品調査

◇化学関連システムの設計・開発関連業務

■化学関連支援システムの設計・開発および支援実績

1. パターン認識による構造-活性相関・ケモトリクス支援システム；
ADAPT (米国ペンシルバニア州立大学 (基本部分構築)、富士通 (GUI 部分構築))
2. 人工知能によるバイオアナログウス化合物創出システムの設計支援と立ち上げ；
EMIL (京都大学農学部との共同開発)
3. 生体内代謝予測支援システム構築 (北里大学薬学部との共同開発)
4. 合成ルート創出支援システム構築；CASINO (通産省物質研究所との共同開発)
5. 化学スプレッドシートシステム設計支援；KAMELO (田辺製薬様との共同開発)
6. 化学ツールキット構築；CHECK (富士通開発)
7. 3次元構造-活性相関支援システム構築；SARD (富士通開発)
8. J01Sオンラインシステムの化合物データ移行設計支援

◇バイオ／蛋白インフォマティクス関連業務

■バイオ／蛋白インフォマティクス関連の業務内容

- ★本業務は1999年10月より始めたものであり、多くの実績はない。
- ★現在行っている業務中心にまとめる。

1. バイオ（特に解析系）関連研究の全般的調査
2. ポストゲノムにおけるバイオ解析システムの検討／評価

- バイオ関連支援システムの設計・開発および支援実績

1. モチーフ探索システム設計（国立遺伝学研究所）；初期の参加のみ（1999年）
モチーフ探索へのパターン認識適用の可能性の検討
2. SNP¹解析関連業務
 - ・徳島大学医学部ゲノム解析センター 板倉光夫教授による重点領域研究「ヒト遺伝子多型系の体系的解析による疾患遺伝子の解析」に参加
 - ・鎌谷直之教授（東京女子医科大学膠原病リウマチ痛風センター センター長）との遺伝子多型解析システム開発関連作業に従事
3. 発現プロファイル解析関連業務
- ・NEDOプロジェクト
“遺伝子発現頻度解析（通称 高原プロジェクト）”への参加（2000年度）
発現プロファイルデータベースシステムと連携する薬理活性データベース構築

- 蛋白関連支援システムの設計・開発および支援実績

1. 蛋白シミュレーション関連業務
 - ・NEDOプロジェクト（2003より参加、2007年終了）
“生体高分子構造情報利用技術開発（通称 中村プロジェクト）”への参加
2. 創薬バリューチェーン（大阪大学坂田教授主催）への参加（2005より参加）
 - ・産官学の3共同体制で行う新規医薬品開発を目指したコンソーシアム

◇環境関連業務

■環境関連の業務内容

1. 生体毒性（発ガン性）関連研究；J u r s 研究室での研究
 - ・ ADAPTシステムを用いた多変量解析／パターン認識による発ガン性予測
2. 環境ホルモン特性に関する研究
 - ・ ADAPTおよびT s e rシステムを用いた環境ホルモン特性に関する研究
 - ・ 環境関連支援システムの設計・開発および支援実績；
 1. 財団法人化学物質評価研究機構のWEB上での毒性予測システムの設計および開発支援
 2. 財団法人製品評価研究機構および通産省（現；文部通産省）からの調査依頼
「諸外国における化学物質規制に関する構造－毒性相関の適用」に関する調査
 3. 環境研究所（筑波）との化学物質毒性予測に関するシステム開発共同研究開始
 4. 国立医薬品食品衛生研究所との共同研究
 - ・ ADMEWORKSで用いる化審法および業審法関連化合物規制予測モデルの開発
 - ① Ames 試験予測モデルの構築（TA98およびTA100）：2004年度
 - ② 染色体異常試験（小核試験）予測モデル構築：2005年度
 5. 大阪府立環境研様との、皮膚感作性予測に関する共同研究実施：2006年度
 6. 国立環境研究所様、環境毒性予測に関する共同研究及びシステム構築
 - ・ 2007年度；甲殻類遊泳阻害試験48時間EC50、藻類生長阻害試験72時間EC50
 - ・ 2008年度；LogP 推算式の構築支援
 7. （財）日本自動車研究所様への研究業務支援
 - ・ 廃棄ガスと発がん性の相関解析支援
 8. 厚生労働省、感作性物質分類小委員会での皮膚／気道感作性予測モデルの構築

◇医療関連業務

■医療関連の業務内容

1. 日本医科大学様との医療を目指したNMRメタボノミクス関連研究支援
2. 皮膚および気道感作性予測に関する支援作業：感作性物質分類小委員会（福井大学様）

自己紹介:名刺

株式会社
インシリコデータ



代表取締役社長

薬学博士 湯田 浩太郎

Yuta

Kohtarō

〒275-0025 千葉県習志野市秋津5-19-5

TEL&FAX:047-453-1850

E-mail:k-yuta@insilicodata.com

URL:http://www.insilicodata.com/

■ 主査

CBI学会:計算毒性学(Computational Toxicology)研究会

http://cbi-society.org/home/meeting_ctox.html

<http://comp-toxicology.com/index.html>

■ 理事

NPO法人 サイバー絆研究所

<http://join-ica.org/ica/index.html>

■ 幹事

日本薬学会 構造-活性相関部会

http://bukai.pharm.or.jp/bukai_kozo/jindex.html

関連紹介: インシリコデータホームページ

株式会社 インシリコデータ 

Have a great new year 2020 ! New !! ◆ 東北大学薬学部にて湯田が講演致します: 演題: In Silico未来型創薬基盤: 人工知能の発展

Home Consulting Services Technologies Solutions Topics Proposals About ISD Contact ISD Collab

The In Silico Data promotes
**Chemical
Artificial Intelligence
&
Chemical Data Science**



2020
HAPPY NEW YEAR
In Silico Data



迎春
謹賀新年
化学データサイエンス
ビッグデータ
人工知能
In Silico Data

- Proposals :**
 - Parallel In Silico Screening
 - Integrated Concept of Drug Design
 - Other Related Proposals
- Technology :**
 - AI(Artificial Intelligence) and PR/MVA
 - K-step Yard sampling methods
 - Tailor Made Modeling (Prediction)
- Basic :**
 - Compounds and Toxicology
 - Drug, Agro/Functional Chemicals
 - Chemometrics and Data Science
- Case Study :**
 - QSAR, QS(ADME)R, QSTR, QSPR
- List :**
 - Research Achievements
 - Presentations
 - Publications
 - Patented and Pending Applications
- Others :**
 - Technical Terms
 - Reference Materials
 - New Documents
 - * Collaborative softwares and organization

NEW! 人工知能による創薬、安全性評価
インシリコデータ関連ブログ
KY法関連ブログ
インシリコスクリーニング関連ブログ

Drug Design and Toxicity Prediction by AI
Insilicodata related blog
Blog of the KY-methods
Blog of in silico screening

What's new on the In Silico Data ?
--> Please click here <--

In Silico Data, Ltd.

関連紹介: CBI学会計算毒性学研究会



The Chem-Bio Informatics Society

情報計算化学生物学会

HOME
講演会
年次大会
研究会/若手の会
刊行物
CBIIについて
入会ご案内
お問合せ

研究会

» 研究会 募集

FMO研究会

計算毒性学研究会

個別化医療研究会

若手の会

»»English HOME

計算毒性学研究会

設立趣旨: 世界的、かつ多くの研究分野で毒性(安全性)に関する重要性が急速に高まっており、特に計算毒性学への期待や役割が急速に拡大している。このような流れを受け、欧米では国家レベルでの研究戦略や研究機関、研究グループ等が立ち上がり、積極的に活動中である。日本では計算毒性学に関する認知度が殆ど無い。このままでは欧米との差が拡大し、日本は計算毒性学研究で発言権を失ってしまう。このような状況を打破する第一歩として、日本で最初となる計算毒性学研究会を設立したい。なお、計算毒性学は多くの研究分野より構成される複合研究である。この点で、多くの研究者が集える研究会形式は最適と言える。

主査	湯田浩太郎 (インシリコデータ)
副主査	水間 俊 (帝京平成大学薬学部)
幹事	石田誠一 (国立医薬品食品衛生研究所)
	井上佳久 (パソルファーマ・パートナーズ株式会社)
	植沢秀広 (明治薬科大学)
	狩野 敦 (株式会社モルシス)
	坂 幹樹 (東京大学医学部)
	櫻谷祐企 (製品評価技術基盤機構)
	佐藤一博 (福井大学医学部)
	曾根秀子 (横浜薬科大学)
	根本 直 (産業技術総合研究所)
	長谷川 清 (中外製薬株式会社)
	古田一匡 (富士通株式会社)

計算毒性学研究会 ホームページ

<http://comp-toxicology.com/>

計算毒性学研究会 スケジュール

更新2020.1.1

2014-2018年度 ★申し込み受付中

研究会	日時	テーマ
第18回	2019年 10月24日(木) 14:00-15:30	第18回 計算毒性学研究会 「FS-17 未来化学データサイエンス、毒性予測検出と予測、ロボット合成と創薬」 /東京・タワーホール船堀 (CBI学会2019年大会にて)
第17回	2019年 10月23日(水) 16:30-18:00	第17回 計算毒性学研究会 「FS-13 OECD の動物実験代替法、化合物ライブラリー、ADMET データキュレーション」 /東京・タワーホール船堀 (CBI学会2019年大会にて)
第16回	2019年 10月22日(火) 14:00-15:30	第16回 計算毒性学研究会 「FS-02 立体構造データベース (3DMET) での討論、ChemAxon におけるAI適用について、生物/化学的等価性でのリガンドや蛋白デザインへのAI適用」 /東京・タワーホール船堀 (CBI学会2019年大会にて)
第15回	2018年 10月10日(水) 16:00-17:30	第15回 計算毒性学研究会 「FS-10 人工知能(AI)およびビッグデータ(BD)統合による「化学データサイエンス」-計算毒性学、創薬、物性評価、他への展開(1)-」 /東京・タワーホール船堀 (CBI学会2018年大会にて)
第14回	2018年 10月9日(火) 16:00-17:30	第14回 計算毒性学研究会 「FS-08 計算毒性学-実践・適用編」 /東京・タワーホール船堀 (CBI学会2018年大会にて)
第13回	2018年 10月9日(火) 14:00-15:30	第13回 計算毒性学研究会 「FS-03 計算毒性学-基本技術編 (ケモメトリックス、QSAR、メタボロミク

関連紹介: 計算毒性学研究会ホームページ

CBI学会

「計算毒性学」研究会

▶ HOME 計算毒性学 お知らせ 研究会について ご意見/討論 入会ご案内 お問い合わせ

計算毒性学 適用分野 計算毒性学 研究分野 計算毒性学 基礎技術分野 ソフト関連 関連資料 会員専用



Computational Toxicology

計算毒性学(Computational Toxicology)をメインテーマとします。主たる活動として、研究会の開催、情報交換や会員同士の討論を行います。本ホームページは、計算毒性学に関する日本で最初のものとなります。昨年10月にCBI学会傘下の研究会組織(「計算毒性学(Computational Toxicology)研究会」として)が立ち上がり、本ホームページは、研究会のホームページとして立ち上がり、計算毒性学に関心のある方々の参加をお待ち致します。

計算毒性学(Computational Toxicology)とは、コンピュータを用いた毒性学に関する研究を指します。CBI学会傘下の「計算毒性学(Computational Toxicology)研究会」が主催しています。本ホームページは、計算毒性学に関する日本で最初のものとなります。昨年10月にCBI学会傘下の研究会組織(「計算毒性学(Computational Toxicology)研究会」として)が立ち上がり、本ホームページは、研究会のホームページとして立ち上がり、計算毒性学に関心のある方々の参加をお待ち致します。

本ホームページは、CBI学会傘下の「**計算毒性学(Computational Toxicology)**」研究会が管理運営致します。「計算毒性学」研究会はCBI学会傘下の研究会組織として2014年10月に発足致しました。「計算毒性学」研究会の主たる活動は、研究会の開催、会員相互の情報交換、計算毒性学に関する討論、計算毒性学に関する世界の動きや活動のフォロー、その他です。

お知らせ、掲示板



千葉県習志野市の谷津バラ苑です

トピックス



谷津バラ苑

CBI学会HP



谷津バラ苑

↑ PAGE TOP

関連紹介：サイバー絆研究所 (Institute for Cyber Associates, ICA)



人を結び、知をつないで、学びと仕事の機会を創出する、サイバー絆研究所

Institute for Cyber Associates

HOME

ICAの概要

- この組織について
- 沿革
- 設立趣旨書・定款

ICAの事業

講演会/イベント

パートナー

入会案内

各種資料

会員専用

お問い合わせ

----- LINK -----

CBI forecast

■ この組織について

[ICA案内パンフレット](#)»PDF

組織の使命

サイバー絆研究所 (Institute for Cyber Associates, ICA) は、主に組織に属していない幅広い世代の知識労働者(Knowledge Worker)たちが、PC (パソコン)、インターネット、高機能の携帯電話 (Smart Phone)など、いわゆるICTを活用することによって、社会との絆を維持しつつ、自ら雇用やビジネスの機会を創出していく活動を支援することを使命Missionとしています。

NPO法人としての組織

<役員>

理事長	神沼 二真	株式会社 バイオダイナミックス
副理事長	佐々木 浩二	株式会社 アドイン研究所
理事	三輪 錠司	
理事	田中 博	東京医科歯科大学
理事	湯田 浩太郎	株式会社 インシリコデータ
理事	鈴木 俊行	株式会社 アクアサイエンス研究所
理事	前島 敏正	MACメディカル
理事	堀内 正	
理事	多田 幸雄	
監事	生島 高裕	株式会社 数理先端技術研究所

ご清聴ありがとうございました

株式会社 インシリコデータ
湯田 浩太郎