

医薬品研究開発の情報交換の広場 CADU Platform 計画について
(「CBI 学会一部事業の引継ぎについて」を改題)

1. はじめに

去る 6 月 18 日の C B I 学会の理事会とそれに続く話し合いにより、NPO 体制に移行する CBI 学会の活動のうち、任意団体として残された CBI Work Plaza など残余の事業を特別顧問としての私が引き継ぐことになり、7 月 19 日に引継ぎの事務も終え、具体的な活動を始めることになりました。

この引継ぎ事業には、残務整理的な性格があり、その実行は私に一任されております。しかし、私としては、この事業の利益関係者(Stakeholders)である CBI 学会の会員の方々にこの件について説明し、その協力をえて、できるだけ有意義な成果を挙げられるように努力したいと考えています。この話し合いは、幾度か行いたいと考えておりますが、今回はその最初の試みです。この資料では、この事業の概略について説明します。

2. 引き継ぐ事業について

今回の引継ぎについては、CBI ネットワーク、CBI Work Plaza、CBI クラウドなどさまざまな事業が関係しておりますが、その主な活動は、私が“CBI Work Plaza”と称して提案し、一部実行してきた事業です。この事業の源流は、それまで CBI 研究会と称していた CBI 学会が、「学会」に名称を変更し、最初の年会を開催した時期(2000 年)に遡ります。この時期までの会の主な活動は、ほぼ月例の研究講演会だけでしたが、この年から年次大会の開催、翌年から英文のオンラインジャーナル(CBI Journal)の刊行を開始しました。この 3 つの事業に加えて私は、2000 年の大会で提案した CBI Grand Challenge と呼ぶ野心的な課題の一部に取り組みないのかと考えていましたが、その具体的な課題のイメージを 2001 年の 7 月に、学会のホームページに掲載しました(添付資料-2 参照)。

このような課題への挑戦は、何よりも事業費がないと無理な話ですが、目標を掲げて必要性を繰り返し訴えていくことで、協力者がでてきて、実現の可能性が開けてくるだろうという期待の下に、毎年の会の活動報告にも、この事業に関することを、記載するようにしておりました。その後、この構想で掲げていた FMO の発展を想定していた大規模分子計算は、期待どおり大いに発展しています。そのことに CBI「学会」がどれだけ関与してきたかは、人によって判断が異なると思いますが、肝心なのは担い手が誰であれ、それらの課題が実現していくことだと考えています。つまり、誰かが挑戦してくれているなら、同じことをやる必要はなく、まだ、取り組まれていない課題を立ち上げればよいというのが、この Grand Challenge の精神でした。

その後、2004 年度から、広島大学(相田美砂子教授の研究室)や東京医科歯科大学(田中博教授の研究室)などで、特任教授として人材養成に係わったことから、「計算創薬環

境をアカデミアに開放する」ことや、「計算機を医薬品の研究開発に活用するための Portal（ショールームサイト）を構築し、研究者の情報の広場とする」ことをめざした CBI Work Plaza 計画を構想するようになりました。この構想については、協力者をえて、それぞれの大学で実験的な試みが行われました。またその間の、2010 年 6 月 21 日には、「CBI Work Plaza の構築」と題する会合で、法人会員などにこの構想を説明しております。

さらに、昨年度は、CBI ネットワークの共同利用者であったアドイン研究所の支援を受けて、CBI Work Plaza 構想を、私たちが立ち上げた新しい非営利組織であるサイバー絆研究所（Institute for Cyber Associates, 略して ICA）の事業として展開する準備を行っておりました。残念ながらこの計画は、アドイン研究所の経営の見直しで、継続が不可能となりましたが、その間に、私たちは、CBI Work Plaza 構想を ICA として引き継ぐための”CADU Platform（キャドゥ・プラットフォーム）“と呼ぶ事業を立ち上げ、昨年の 11 月の大会で、その進捗状況を発表しました。さらに本年度は、その続きを発表する予定であります(投稿済み)。

ここで CADU とは、CADDU（Computer-Aid Drug Discovery, Development, and Usage）の省略形であり、The CADU Platform は、The CADDU Platform と同じ意味に使っています。いずれも、計算機を薬の研究開発 Discovery and Development だけでなく、適切に使用すること（Usage）を含んだ概念です。また Platform は、Work Plaza と同じ意味に使っています。したがって、The CBI Work Plaza と The CADU Platform との違いは、前者が薬の研究開発への計算機の活用であったのに対して、後者では薬を適切に使うために計算機を活用することが含まれていることです。

いずれにしても昨年と今年の大会での発表が、引き継ぎ事業の基本となるものですが、何分、大会のポスターでは、内容が限られておりますので、今回、新しい状況を踏まえて、私の構想を次のように整理してみました。

3. 事業目標と内容

現在の計画では、CBI Work Plaza/CADU Platform 事業の目標は、次の 4 つと考えています。

- （1）CADU Platform の構築：医薬品の研究開発と適切な使用への情報計算技法の活用に関する案内サイトの構築
- （2）「計算化学から計算創薬へ」の入門講座と実習環境の構築
- （3）医薬品の研究開発と適切な使用のためのバイオインフォマティクスの参照サイトの構築
- （4）上記に係わる情報交換と交流

これについて以下、個別に説明します。

3. 1 CADU Platform の構築

引き継ぎ事業の最優先課題である、CADU Platform の基礎となるのは、医薬品の研究開発と使用に関する研究における情報計算技法を俯瞰できる Portal を構築することです。これは言わば Show Room に相当する参照サイトです。そのためにはまず全体の鳥瞰図 Bird's Eye View を作成しなければなりません。現在の製薬企業の研究開発の基本的流れは、下記のようにあらわされます。この過程はパイプラインと呼ばれています。

医薬品開発の流れ: 開発に入ってから生き残る率は、200分の1程度

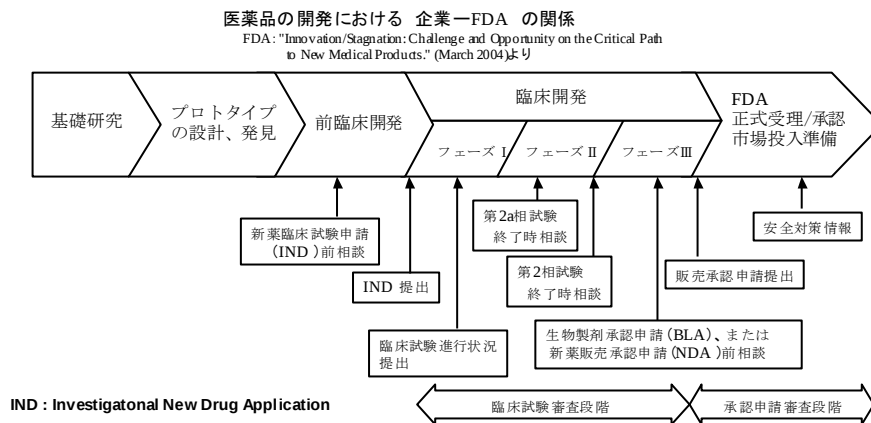


図 1. 製薬企業における研究開発の流れ

この図 1 で区分されている各過程は、それぞれ Mission が明確な仕事の集合であり、非常に学際的です。しかし、これでは研究開発の内容や特徴を表現することはできません。しかも我々の目的は、現在使われている情報計算技法だけでなく、台頭しつつある新しい技法や開発すべき技法をわかりやすく提示する必要があります。そのために考えたのが、図 2 です。ここでは、過程の一部が並列になっています。また製薬企業の中だけでなく、薬が使われる現場(臨床)における対応も含めています。同時に、FDA の Critical Path のような Regulatory な要素や既存の薬の適応を拡大する課題も入れてあります。

この図を出発点として、図の中の個々の要素過程を概観し、それぞれにおける情報計算技法を紹介しようというのが CADU Platform 事業の大筋です。便宜上、この図のそれぞれの部分領域をモジュールと呼び、全体をデッサンしたら、それぞれのモジュールに

については、かなり並列的に内容を深めていくことを想定しています。

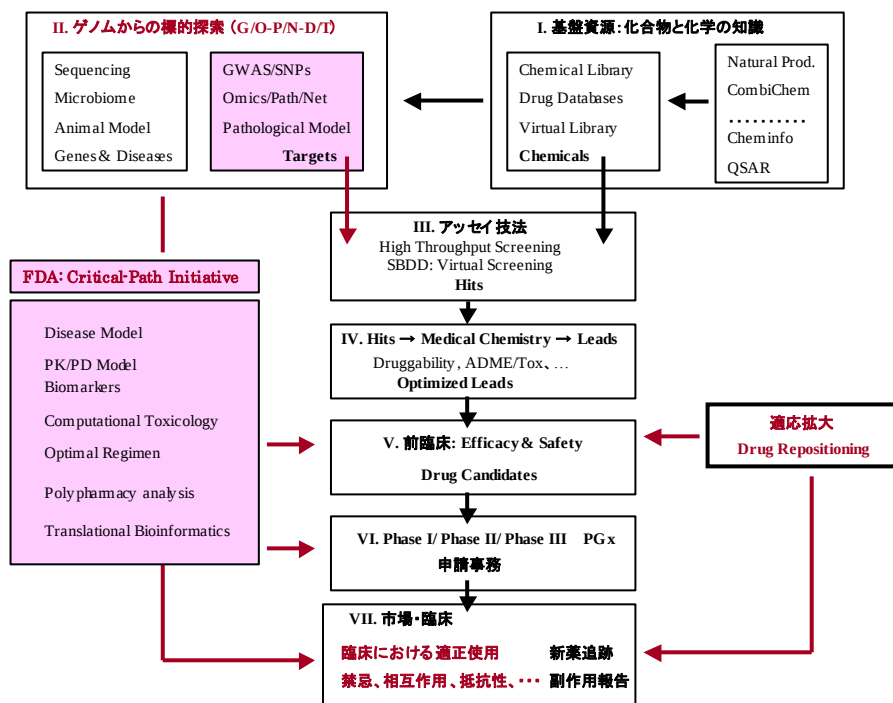


図 2. CADU Platform 構築のための鳥瞰図

私は、この図を描いてみて 2 つの長所があることに気がつきました。その一つは、Chem-Bio Informatics のうちの Computational Chemists と Bioinformatics という専門性の違いです。

これまで Medicinal Chemist は、鳥瞰図の各段階において他の分野の専門家と協力している薬づくりを進めていく先導役と考えられていました。すなわち薬づくりは Medicinal Chemist を中心に回っていました。しかしゲノム革命が進んだ現在では、分子生物学的な専門家の役割が、標的の探索と検証や、開発の後段階や薬が使われる時にも、重要になってきました。

M. J. Kiser et al, Chemical Basis of Pharmacology, Biochemistry, 49: 10267-10276, 2010

この鳥瞰図を使うと、どのような専門家がこれまでどの部分で活躍してきたかということと同時に、これからどのモジュールのどのような部分で、新しい専門家の活躍が期待されているかが明瞭に把握できます。例えば、昨年の CBI 学会と日本バイオインフォマティクス学会との合同年会の 2 日目の、「ケモバイオインフォマティクスとメディシナルケミストリーの協調による画期的創薬への期待」と題された講演において、演者の大谷光昭氏

(塩野義製薬株式会社) が述べられたのが、「図 1 の前臨床以後の過程に **Chem-Bio Informatics** を援用して、中止になる率を軽減することを期待したい」、という意味のことでした。この問題に関しては、(図の中の) **FDA** の **Critical-Path** や、その下のさまざまな新しいタイプの研究や臨床における適切な薬の使い方への情報計算技法の活用が期待されます。このような領域に関係した情報計算の専門家は、**Bioinformatician** と言ってもよいと思われますが、これまでの **Bioinformatician** とは違って、臨床医学の専門家と協力し、深い対話ができる新しいタイプの専門家が求められているのではないかと考えています。もちろん、ある種の技法あるいは専門性は、図の一つのモジュールだけでなく、複数のモジュールにも関与します。**Genome** や **Omics** は、まさにそうした技法です。

このように図 2 の鳥瞰図は、化学と分子生物学という、現在の薬づくりの 2 種類の専門家の仕事がどのようなものなのかを理解し、そこで情報計算技法の専門家がどのような役割を果たせるのかを具体的に理解してもらうためには、至極便利だと思います。そこで、もしそれぞれのモジュールに事例を集め、それによって学習できるようにすれば、次に述べる人材育成としても極めて効果的だと考えています。

3. 2 計算化学と計算創薬の講座と教材

これについては、2010 年 6 月 21 日の「計算創薬は閉塞状況に陥っていないか？」と題する **CBI** 学会の研究講演会で概略を提案しました。

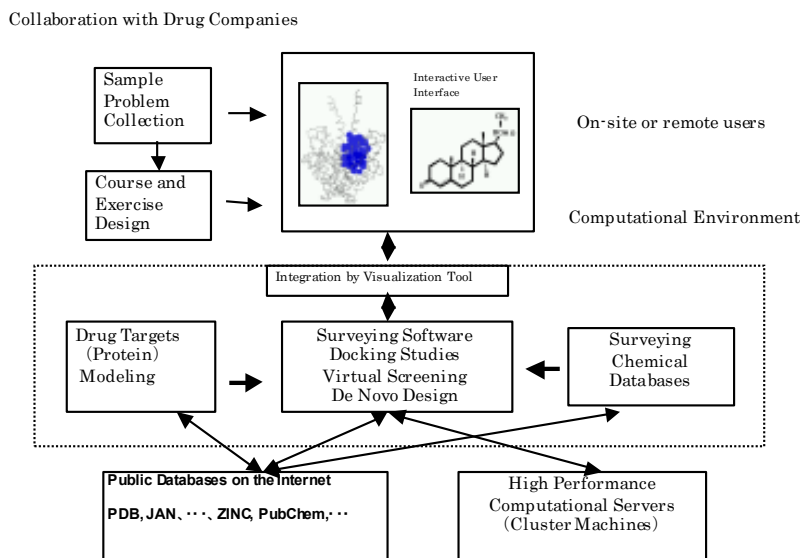


Image of the Workbench for Drug Discovery in Academia
 広島大学相田美砂子研究室、科研費(2006-2007)

その時の提案は、アカデミアに創薬研究のための計算環境をつくれないかというものです。これが CBI Work Plaza の具体的な活動事例になっていました。このシステムの最初は、図のように広大の相田研究室で原田隆範博士が担当され、FMO 計算を入れた実習教材の開発には、中野達也博士、福澤薫博士、日向寺祥子博士らと小宮山直美氏らが協力されました。その後、東工大（小長谷明彦教授）と東京医科歯科大(田中博教授)の大学院の共同教育プログラムの一環として、上林正巳氏（当時、東工大の特任教授）や中田吉郎（群馬大学名誉）教授が、計算環境とネットワーク環境を構築されました。そこでは CBI 学会が購入した 5 台の PC が使われました。その後、このシステムは、遠隔ではなく、手元に置いた気軽に使えるタイプの計算サーバーにまとめられています。

こうしたシステムの完成度を高め、AutoDock や GAMES, FMO のような一般に公開されている計算資源と、同じく一般に公開されている化合物データベースを利用した、できるだけ Open な講座を作成することが我々の目標です。

ここで重要なのは、アカデミアだけでなく、製薬企業や Solution 企業の専門家に協力していただき、「Medicinal Chemist と対話のできる計算化学の専門家を生み出せる」教材を集めることだと考えています。

3. 3 バイオインフォマティクスの参照サイトの構築

私たちは Chem-Bio Informatics を、Chemical Informatics & Computing と Bioinformatics & Biological Computing という意味に使っています。Bioinformatics は、Molecular Biology における Informatics & Computing と考えてもよいと思われます。ここで Chemical Informatics & Computing は、Computational Chemistry と Chemical Informatics という 2 つの分野に分類されており、その内容は少なくとも、CBI 学会が活動し始めた頃とあまり変わっていません。これに対して、Bioinformatics の内容は、急拡大の一途を辿っています。その理由は、適応される研究領域が、どんどん広がっているからです。現在、全盛なのは“pathway/network to …”に対応する領域です。一方で Pharmacoinformatics や Systems Pharmacology などという言葉も使われています。

生命系は複雑ですが、それを制御しようとする薬の研究は、もっと複雑です。したがって、医薬品の研究開発に必要とされる Bioinformatics も、まだまだ多様に分化していくと思われます。したがって、それを“xx-informatics”と表現してもあまりご利益はないように思われます。要するに、必要なのは、生命の理解から薬の使い方に至るすべての研究領域に係わる情報計算技法です。それゆえ、図 1 のモジュールに含まれる情報計算技法は、図 3 のように、生体分子から個体、生物の集団に至るさまざまな階層の問題解決に活用される技法ということになります。

しかし、それではサイトが構築できませんから、私たちはまず図 1 のモジュールの II

の「遺伝子から標的の探索」の部分に集中し、その後に、前臨床以後の段階の技法の整理をしたいと考えています。

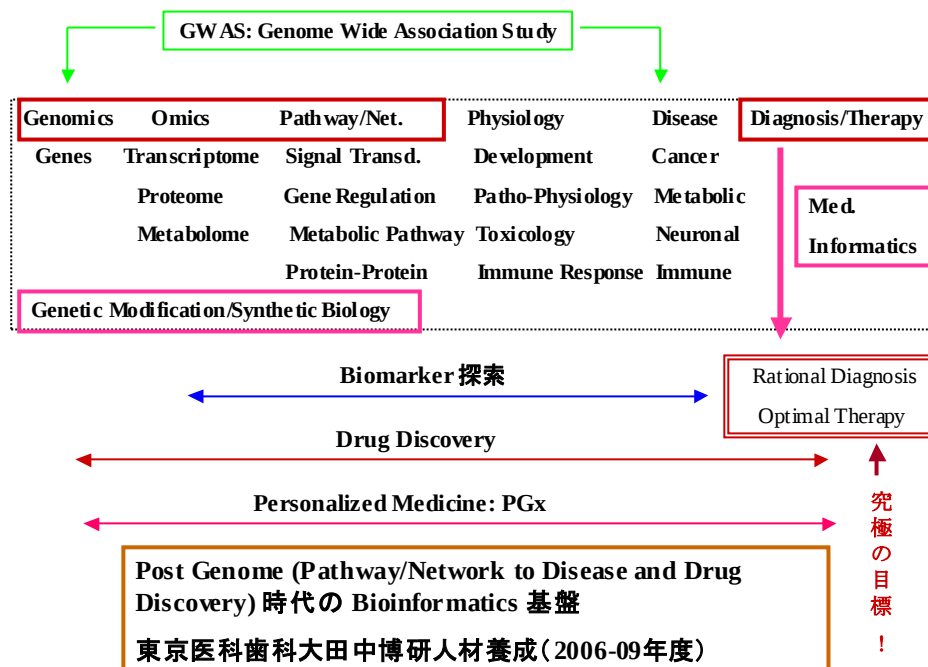


図 3. 医薬品の研究開発と使用に必要な情報計算技法

このような技法の多くは、図 2 の FDA の Critical-Path やその下のバイオマーカー探索や Translational Bioinformatics など、いわゆる Translational Science にも関係しています。文献で見る限り、欧米ではこの分野は非常に関心が高くなり、研究も活発になってきているようです。ところが我が国では、国の関心は極めて低く、さらに実施しようにも、NIH のような司令塔がありませんから、省庁横断的な烏合の衆になりかねません。ですから、この分野を担う新しいタイプの Bioinformatician は、意識的に育成する必要があると思います。

私は、そのために田中博教授と連係して、Genome-Omics-Pathway/Network to Disease/Target を意味する G/O-P/N-D/T 研究会の立ち上げを試みています。これについては昨年の大会でも発表しました（この研究会は田中博教授会長を務められているオミックス医療研究会（学会）の分科会としても位置づけられています）。

4. この Portal の効用

私たちが構築しようとしている Portal サイトの主な目的は、医薬品の研究開発と使用の分野への情報計算技法を紹介することですが、それにはどのような効用があるのです

ようか？私たちが最初に意図したのは、こうした分野への計算化学や **Bioinformatics** の専門家の参入障壁を低くすることです。それは次のような意味においてです。

薬づくりは、極めて学際的な領域であり、関心をもっているアカデミアの研究者は沢山います。しかしながら医薬品の研究には、基礎科学の側面と、規制産業、規制サービスの側面があります。後者についてはアカデミアで教えられる機会は、薬学や医学の一部の講義以外ではほとんどないと思われます。しかし今や、医薬品の研究開発や使用には、薬学以外の、とくに化学や分子生物学に関連した情報計算技法の専門家が必要とされるようになってきています。そこで製薬企業や規制に係わっている国の研究機関、あるいは薬を使っている医療機関でも、膨大なデータが扱える新しいタイプの専門家を必要とするようになってきています。しかしながら、薬づくりの世界は、依然として部外者にとってそうわかりやすい専門領域ではありません。外部からの専門家にとって、**Regulatory** な科学の問題を学べる機会は、まだ、あまりありません。その意味では、**CADU Platform** をアカデミアにも、役に立つ内容にできればよいと考えています。

もちろん、内容が深くなってくれば、上記の（１）－（３）は、製薬企業にとっても役立つと思われます。その理由の一つは、薬の研究開発と使用に係わるデータベースやツールのうち、一般に公開されている（**Publicly available** な）ものが急激に増え、内容も大変充実したものにねっているからです。このことは、「公的資金で行っている研究開発事業の成果は、早く公開し、医学の進歩や薬づくりを加速すべきだ」という欧米の政策を反映されているように思われます。いずれにしろ、そのような開かれた資源をどう利用するかは、閉じた世界よりは、開かれた学際的なコミュニティの中で検討した方が容易であり、有益でもあると思われます。

5. **CADU Platform** の構築方法

上記のことは、この **Portal** をどのように構築して、発展させていくかにも関係しています。私は、**CADU Platform** は、「その各モジュールに対応する専門知識のコミュニティにとって興味があり、有益であり、それゆえ自分たちの仕事として参加してもよいと認識されるようであれば、発展させていくことは不可能だ」、と考えています。

しかしながら、そのように認識してもらうためには、各モジュールのイメージを、ある程度、最初にはっきりさせておく必要があります。私はこれを「呼び水」作業と呼んでいますが、そうした作業は、より少数の先導的な協力者にお願いできないかと考えています。したがって **CADU Platform** 事業の最初の関門は、この呼び水的な段階にあります。こうした先導役をお願いしたいのが、これまで **CBI** 学会にも係わってくださったことがある（退職者も含む）研究者の方々です。計算化学の分野では、このような研究者がおられますが、歴史が浅い **Bioinformatics** 分野では、そうした研究者がほとんどいないように思われます。しかも、この分野はいまだ、内容が刷新され拡張されているので、若手の研究者たちに協

力していただくしか、方法がないように思われます。

したがって CADU Platform を構築するためのコミュニティは、そのような若手研究者にも、魅力のある情報交換と交流のための機会である必要があります。

このように CADU Platform 事業の成否は、個別モジュールに対応した専門領域に属する研究者のコミュニティをどう構築するかに依存しています。この専門領域は、CBI 学会を越えて広がっていますし、領域によっては、我が国には専門家がほとんどいないところもあります。これについては、海外の専門家の応援をうることが必要だと考えています。

6. CADU Platform 構築は未来思考

最初に述べましたように今回引き継ぐことになった CBI Work Plaza 構想には、10 年以上の歴史があります。私がこれまで紹介や提案していることで、なかなか、受け入れられなかったという例は、いろいろあります。例えば、いまや当たり前に使われている Pathway/Network にしても、最初に CBI 学会の紹介した時には、その意義を見抜いてくださった人は、そう多くありませんでした。その後の FMO の紹介についても同様です。CBI Work Plaza の中に含めている Computational Toxicology に至っては、CBI 学会の発足時から重要性を訴えてきましたが、今日に至るもあまり理解されていません。

ところで、CBI Grand Challenge や CBI Work Plaza の発想には、CBI 学会の揺籃期であった 1980 年代への郷愁があることは、否定できません。当時は、研究講演会で発表するような題材やシステムを、会員の有志が手作りしていたことがありました。つまりその頃の会は、お手本があまりなく、システムや説明書を自分たちで整備しながら、互いに学びあい、知識と技能の向上に努めるところでした。講演会でも喧々諤々の議論がなされていました。その後、当時を知る会員の方々から、CBI 学会が「活気がなく面白くなった」というような励ましの言葉をいただいたことが度々ありました。

ところが時代はめぐり、現在から未来を見れば、またお互いに協力しあえるような、大変面白い時代になってきたように思われます。その兆しを幾つかあげて見ます。

(1) ヒトゲノム解読は、画期的な新薬開発の夢を振り撒きましたが、皮肉なことにその後の大手製薬企業が新薬を市場に出すペースは、むしろ落ちてきました。欧米ではその状況を打開すべく、新しい研究開発モデルを探しています。大手製薬企業は、自分たちが何でもやってしまうという主義を転換して、Collaboration を模索する時代になってきました。国もそうした努力の後押しをしています。その例が Open Innovation、Pre-competitive Research Collaboration, Consortium です。一方で、アカデミアにおける薬づくりへの挑戦も盛んになってきています。残念ながら我が国では、そのような動きは、あまり見られません。CADU Platform へのモジュール的な取り組みは、さまざまな立場にいる研究者たちがお互いを知る情報空間になることをめざしています。この意味で、我が国の医薬品の

R&D を変えることにはならないまでも、異なる立場にいる研究者たちの情報交換と人的な交流の促進には、役立つようにしたいと考えています。

(2) Personalized Medicine は、Participatory Medicine にならざるをえないと言われます。なぜなら、個人個人のゲノムの違い（平均 1200 万塩基）は大きいからです。現在、ヒトの集団のゲノム解析研究者の間で、被験者を単なる患者としてではなく、研究のパートナーと考えるべきであるという声があがっています。こうしたことは結局、医療サービスの受け手としての生活者 Consumer の意識改革をうながしています。こうして生活者が先導する健康対策 Consumer-driven health や患者を中心にした医療 patient-centric medicine への道が開けつつあります。実際に、米国の DIYgenomics (Do it yourself genomics) という非営利組織では、ゲノム解読サービスを利用して生活者が自分たちのゲノムをしらべ、自分たちで選んだサプリメントの効能を試験する、というような試みを始めています。

・ M. Swan, Emerging Patient-Driven Health Care Models: An Examination of Health Social Networks: International Journal of Environmental Research and Public Health, 6: 492-525, 2009.

(3) 上記のことと関係しているのが、wearable/wireless な生体計測装置とスマートフォンやタブレット PC、クラウドと呼ばれているようなネットの第 2 革命を先導している技術の組み合わせです。いまや生活者は、このような道具を活用して、自らの健康状態を自ら記録し、クラウドに転送する時代がやってきました。このような技術についても (Mobile/Ubiquitous/Cloud の意味で) MUC と呼び、昨年の大会に発表しましたが、問題は、そのようなクラウドに集積されるデータをいかに活用するかです。このことは新しい予防医学的なサービスの課題として浮上してきていますが、その影響は、医薬品の臨床試験などにも、影響を与えるだろうと予想されます。

・ E.Topol, "The Creative Destruction of Medicine: How the Digital Revolution Will Create Better Health Care", Basic Books, 2012.

(4) 上記のような流れに関係しているのがゲノム解読の進歩を背景にした個人ごとの薬物への応答特性をしらべる PGx (Pharmacogenomics) です。こうした研究の進歩は、大手製薬企業にも単一の薬で巨大な市場を創出するブロックバスターモデルの修正を迫っています。このことも治験のやり方に影響を与えています。すなわち治験も大規模無作為ではなく、対象を潜在的な患者に絞って実施するようになってくると思われます。

(5) 上のような技術の流れを見れば、将来の薬市場では、個人の特性を計測し、それに合致した薬を選択するだけでなく、それを最も適切に使う研究に行き着くことになる

と思われます。それを概念的に示したのが下の図です。私は、約40年前（1973年）に、通風の薬物療法に関して、この考えを適応した経験があります。最近 Systems Biology や Systems Medicine という言葉が提唱されていますが、問題はシステムの同定だけでなく、制御 Control にあります。現在の薬学教育では、制御の問題が教えられているように見えませんが、私の発想を刺激してくれた（Dynamic Programming の創始者）R. Bellman は、“All medicine is control theory” と言っていました。こうした問題も、Systems Approach と同じように、40 年も前から提唱されていますが、最近は Network Pharmacology などとして研究されるようになってきています。

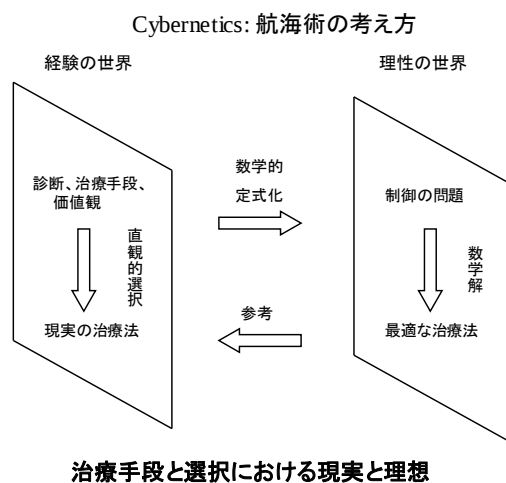


図4. 数学的なモデルを立て、最適に薬をつかう研究の概念

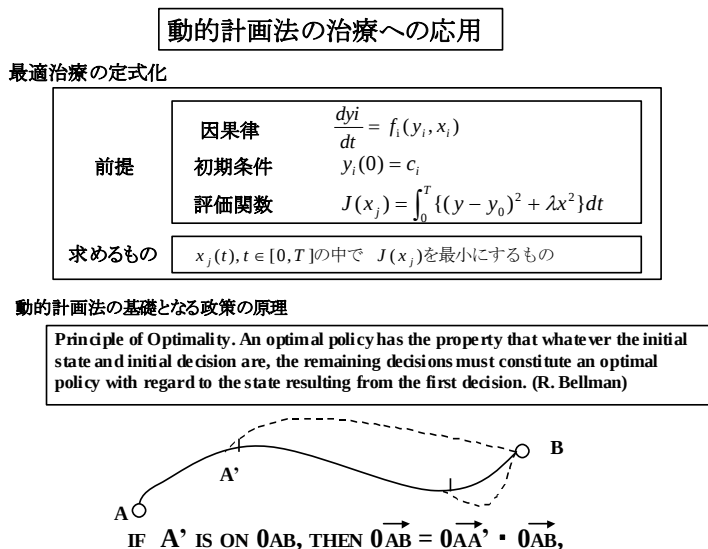


図5. 動的計画法を利用した薬の最適投与計画の例

このような発想は、薬の適切な使い方の科学的な方法を概念的に示したのですが、薬の研究開発でも、臨床における処方の方を考慮すべき時代が必ずやってくると思われます。

7. サイバー絆研究所との関係

CBI 学会の関係者に最初に理解しておいていただきたいことがあります。それは今回の引継ぎが、私個人が責任を負うものになっていますが、この事業は、私たちが新しく立ち上げたサイバー絆研究所 (ICA) との協力の下に進めていくということです。その理由は、現在、私が CBI 学会の事務局とは、仕事の上での繋がりがありません。それゆえ、この事業を実施していくための logistics は、新たに整備しなければなりませんが、それは基本的に、NPO 法人の CBI 学会のそれとは独立の組織となります。と言ってもそのような組織を実際に新たにつくることはできませんから、ICA の組織と事務局機能の一部を活用することになります。

さらに、この引継ぎ事業には残務整理の性格がありますから、任意団体としての CBI 学会は、本年度末で解散することが、組織としては、わかりやすいのではないかと考えています。したがって次年度以降、この事業が継続するとしたら、これを ICA の活動に移行することを想定しております。もともと ICA は、それ自身がひとつの事業を行うことではなく、さまざまな事業を生み出すことを想定していますから、CADU Platform の事業を移管することも、実際は、その事務局を ICA のそれに任せるだけですむと考えています。

しかし ICA に CADU Platform の事業を移行しようと考えているのは、もう少し積極的な理由があります。それは ICA が、「生活者が先導した健康イノベーションへの取り組み (英語では、Health Innovation Initiative, HII、ハイ) という事業を、現在、立ち上げようとしていることです。これはゲノム革命による新しい健康医療サービス時代を先取りする試みですが、6 の項で述べましたように、次の時代の医療や薬づくりは、生活者参加型になると思われますから、現在の CBI 学会の活動も将来自然にそのような動きを反映したものになっていくだろうと思われます。

8. 工程

この事業引継ぎの話が正式になされたのは本年の6月中旬のことです。さらに詳細が把握できたのは7月中旬のことです。したがって私自身、上記で述べた計画を考えたのは、最近のことです。さらに重要なことは、利益関与者である CBI 学会の会員との話し合いが、まだまったくなされていないことです。そこで私としては、この事業を以下の

ように具体化して行くのがよいのではないかと考えています。

- (1) 利益関係者である CBI 学会の会員との間に、連絡できる仕組みをつくる
- (2) CADU Platform のイメージを早期に提示し、議論できる仕組みをつくる
- (3) 8 月 3 日を最初として、この事業について討議できる機会をつくる
- (4) CADU Platform の各モジュールに対応したコミュニティを構築する
- (5) 本年度末に、成果を発表する

9. 仮の事務局機能と作業環境

現在、ICA は実質的にオフィスレスな組織ですので、連絡方法は限られていますが、この事業を担当していただくのは、湯川真澄氏と小宮山直美氏となります（これらの方々は、CBI 学会の事務局の仕事をしていますが、この引き継ぎ事業に関係する仕事は、それとは独立にお願いすることになっています）。

また、成果物である Portal は、ICA のレンタルサーバー上に置くことにします。

10. おわりに

昨年の 3 月末をもって神沼は、CBI 学会の責任ある業務に係わらなくなっていました。それ以後、用賀の事務局の整理を行い、新しい非営利組織を立ち上げましたが、CBI 学会の関係者の方々とは、あまりお話する機会がありませんでした。その意味では私の発想も、もう時代遅れになっている懸念があります。それゆえ、この事業計画につきましても、率直なご意見が賜れたらと願っています。

神沼二眞（CBI 学会特別顧問、サイバー絆研究所理事長）

参考情報

- ・ 神沼への連絡は、これまでどおり kaminuma@cbi-society.org で結構です。
- ・ ICA のサイト；
 - (1) サイバー絆研究所の主サイト (<http://join-ica.org/ica/index.html>)
 - (2) HII Computing Forum (<http://join-ica.org/hiicomp/>)
 - (3) HII Public Forum (<http://join-ica.org/hiipub/index.html>)
 - (4) HII Cloud 事業 (<http://join-ica.org/hiipub/project/cloud.html>)

付録資料—1 CBI 学会の一部事業の引き継ぎに関する 8 月 3 日の説明会のご案内

皆様ご存知のように、昨年度より CBI 学会は、新体制への移行を開始しており、本年度は、認可された NPO 体制への移行が具体的に進められております。これに伴い、これまでの事業のうち CBI ネットワーク、CBI Work Plaza、CBI クラウドなど、さまざまに呼んできた事業を、任意団体 CBI 学会に残す事業として、特別顧問としての私に一任してくださることになりました。

昨年の大震災直後から、CBI 学会の事務局を含めて、会全体の活動を引き継いでくださった現在の執行部は、大変な努力をされて、CBI 学会の更なる発展に向けての体制づくりを推進されています。一方、私は 10 年度の年次大会時の総会に提案して承認いただいた文書にもありますように、「新たな非営利組織を立ち上げ、CBI 学会とは win-win な活動をしていく」、という方針に沿って、NPO 法人サイバー絆研究所（ICA）を立ち上げ、この組織の活動の一環として、CBI Work Plaza 事業を継承する The CADU Platform をすでに立ち上げ、これについて昨年の大会のポスターで共同発表させていただきました。

今回の引継ぎにより、上記の 2 つの流れがようやく合流することになり、win-win の関係構築を具体的に進められることになりました。事務処理上、引継ぎ事業の当面の資金的な管理は任意団体としての CBI 学会として行いますが、実際の活動は、ICA から見れば The CADU Platform の活動とも見なさせるように進めていきます。

一見複雑なようですが、それは複数の組織に関係する活動として、事務処理上の問題がないように関係者が配慮したためであり、活動自体は、CBI 学会の伝統を継いだ、自由闊達、極めて気軽な活動にできると考えております。しかしながら、この件の話し合いに参加されていなかった方々にとっては、引き継がれる事業が何であり、それにどのように関わったらよいのかを、すぐには理解できないのではないかと思います。

そこで、この件につき、来る 8 月 3 日の研究講演会の後、ご説明と意見交換のための機会を持たせていただくことにしました。これも、気軽な 30 分程度の説明と質疑のための会なので、ぜひご参加を検討ください。なおこの引き継ぎの事業の内容は、その前の研究講演会を聞いてくださいますと、よりよく理解していただけると考えておりますので、研究会へのご参加もご検討ください。なお、ご参加できない場合でも、本件に関するご質問があれば、遠慮なく（神沼 kaminuma@cbi-society.org まで）お寄せください。

神沼二眞（CBI 学会特別顧問、サイバー絆研究所）

付録資料—2：CBI Work Plaza 事業の経緯

2000 年以前

CBI 学会が CBI 研究会と呼ばれていた時代から、「医薬品と毒性の研究の情報計算基盤を整備する」ことを使命として掲げていた。

2000 年

第 1 回の (年次) 大会で、神沼はゲノム革命の時代の到来に対応して、CBI 学会は、Grand Challenge という構想を立てて、挑戦したいと宣言した。

2001 年

神沼は、Grand Challenge に関する具体的な活動として、

- (1) 大規模分子計算
- (2) 医薬品候補化合物のデータベースと解析
- (3) PHII 計画-その 1：ADME に関する知識ベースの構築
- (4) バイオネットワーク
- (5) マイクロ AI 計画 (Micro AI Project)
- (6) CROSSA (Cross Species Analyses) 計画
- (7) コンソーシアムの基盤ネットワークの構築
- (8) 検討中の課題：計算毒性学

を提案し、それを CBI 学会の 2001 年 7 月 18 日にホームページに掲載した。

この画面は、現在の学会のサイトからは見えないが、“Internet Archive”サービスで、<http://www.cbi.or.jp> を打ち込むと、過去のウェブサイトが時系列的に参照できる。ここで、2001 年 7 月 21 日をクリックすると、下記の URL に飛ぶ；
<http://web.archive.org/web/20010721104320/http://www.cbi.or.jp/>

2006-7 年：科研費による実験

2005 年、広島大学大学院理学研究科の特任教授であった神沼は、同科の相田美砂子教授の要請によって、「計算創薬環境をアカデミアに開放する」という課題で、科研費に応募した。この 2 年間の研究は採択されたが、神沼が東京医科歯科大学に移動したため、実施は相田研究室の原田義範博士に引き継がれた。これには ABINIT-MP 版の FMO 法のソフトウェアを開発していた国立衛研の中野達也博士、福澤薫博士、東海大学の日向寺祥子博士らが協力し、4 日間の実習教材が作成され、実施された。

2008 年

年次大会後に、2000 年に提唱した CBI Grand Challenge を、CBI 学会として取り組むべ

き長期構想として再考し、その中に計算創薬教育を位置づけることを考えた。

2009 年

CBI 学会が維持しているネットワークとサーバーの活用と、計算創薬教育環境の整備を結びつけた「CBI Work Plaza」構想を提案した。下記は文書とそれらが作成された月である。

1 月：「SBDD 入門講座のための教材および教育環境開発計画」

2 月：「CBI 学会のサーバーについて」

7 月：「CBI Grand Challenge Platform (CBI Work Plaza) の構築」

8 月：「計算創薬 Platform の構築について」

10 月：神沼は、「計算創薬教育課程 Advanced CADDD」を構想し、これを CBI Work Plaza 構築の一部とすることを提案した。

11 月：韓国釜山における年次大会で、“CBI Work Plaza” as Pre-competitive Initiative と題するポスター発表を行う。発表はサーバー委員会のメンバーを含む。

2010 年

6 月 21 日：「CBI Work Plaza の構築」(資料を添付)について、法人会員などに説明。

10 月：CBI 学会の年次大会で、“CBI Work Plaza” as Pre-competitive Initiative II”を、前年と同じメンバーで発表。

11 月：東京工業大学(小長谷研)と東京医科歯科大学(田中博研)の大学院共同教育プログラムの一環として、CBI 学会の Work Plaza に関連した計算創薬教育課程の構想を参考にすることになり、上林理事、中田吉郎理事が、アドイン研究所に新規に設置した PC クラスタ上に教育用のソフトウェア環境の構築を始めた。

2011 年

11 月：アドイン研のシステムを基盤とした教育環境について、CBI 学会の年次大会(神戸)で、Building “The CADU Platform” and Computational Chemistry Courses on it と題して発表した。

その後、アドイン研との共用の CBI 学会のインターネット接続環境は、運営が停止され、ソフトウェアの搭載が進んでいた PC クラスタは、上林正巳理事が管理下に移設した。

2012 年

2 月：2 月 24 日の、CBI 学会関係者と神沼との話し合いにおいて、この構想自体はまったく CBI 学会から切り離すという CBI 学会の見解が示され、神沼は、上林正巳理事と相談の上、これを ICA 独自の事業として再定義し、継続していく道を模索することにし、この事業を The CADU Plaza 事業と呼ぶことにした。

6 月：CBI 学会の理事会で、CBI Work Plaza 事業は、正式に ICA に移管されることになった。