

# プログラム

## 1日目(12/12)

[参加登録] (8:30-9:00)

[開会式] (9:00-9:10)

[基調講演](9:10-10:00) 座長: 杉本 学(熊本大院先端科学)

PL-01 ○大田雅照(理研)

「生理活性物質の創製におけるインシリコ技術 –その価値と可能性–」

[口頭発表 1](10:10-11:10) 座長: 高谷大輔(理研)

1O-01 ○天野将之<sup>1</sup>, 中村朋文<sup>1</sup>, 杉浦正晴<sup>2</sup>, 高宗暢暁<sup>3</sup>, 松岡雅雄<sup>1</sup>, 満屋裕明<sup>1</sup>(<sup>1</sup> 熊本大医,<sup>2</sup> 崇城大薬,<sup>3</sup> 熊本大創生,<sup>4</sup> 国際医療研)

「HIV-1 の必須構造蛋白であるキャプシドに対する新規阻害剤の開発」

1O-02 ○井上貴文<sup>1</sup>, 吉田一輝<sup>1</sup>, 高木克志<sup>2</sup>, 本間光貴<sup>4</sup>, 福澤薫<sup>5</sup>, 杉本 学<sup>1-3</sup>(<sup>1</sup> 熊本大院自然科学,<sup>2</sup> 熊本大工,<sup>3</sup> 熊本大院先端科学,<sup>4</sup> 理研,<sup>5</sup> 星薬科大薬)

「電子状態インフォマティクスに基づくタンパク質-リガンド間の相互作用強度の分類」

1O-03 ○上野美乃李, 横井大洋, 中川好秋, 宮川恒(京大院農)

「テトラヒドロキノリン型脱皮ホルモンアゴニストの構造活性相関研究」

[依頼講演](11:20-11:50) 座長: 本間光貴(理研)

IL-01 ○大川和史(旭化成ファーマ)

「AI で広がる創薬研究」

(11:50-13:10) ランチョンセミナー + 昼休み

[ポスタープレビュー](13:10-13:55) 座長: 原田俊幸(住友化学)

[ポスター発表](14:00-16:00) (奇数番号発表: 14:00-15:00; 偶数番号発表: 15:00-16:00)

(プログラムは末尾に記載)

[特別講演](16:10-16:50) 座長: 中川好秋(京大院農)

SL-01 ○金谷重彦(奈良先端大)

「二次代謝物の生合成経路の悉皆的解析を目指したデータサイエンス」

[口頭発表 2] (16:50-17:50) 座長: 浴本 亨(横浜市大生命医科学)

1O-04 ○寺前裕之<sup>1</sup>, 玄美燕<sup>2</sup>, 山下司<sup>2</sup>, 高山淳<sup>2</sup>, 岡 真理<sup>2</sup>, 坂本武史<sup>2</sup>(<sup>1</sup>城西大理,<sup>2</sup>城西大薬)

「機械学習と分子軌道計算を用いた物性予測」

1O-05 ○瀧本征佑<sup>1,2</sup>, 日向栞<sup>1</sup>, 西川文太<sup>1</sup>, 松尾美登理<sup>1</sup>, 山上あゆみ<sup>3</sup>, 中野雄司<sup>3</sup>, 中川好秋<sup>1</sup>, 宮川恒<sup>1</sup>(<sup>1</sup>京大院農,<sup>2</sup>日本たばこ,<sup>3</sup>京大院生命科学)

「非ステロイド型ブラシノライド様化合物 NSBR1 の合成展開」

1O-06 ○田原優樹, Eric T. Kool (Stanford Univ.)

「DNA 修復酵素 8-Oxoguanine DNA Glycosylase の強力で選択的な阻害剤の創出」

[特別講演] (17:50-18:30) 座長: 竹田-志鷹真由子(北里大薬)

SL-02 ○塚本佐知子(熊本大院生命科学)

「天然有機化合物の構造多様性と生物活性」

[懇親会] (19:00-21:00) 熊本市民会館 勸業館食堂

## 2 日目 (12/13)

[特別講演] (9:00-9:40) 座長: 飯島 洋 (日大薬)

SL-03 ○広野修一 (北里大薬)

「In Silico 創薬基盤技術としての Fragment Mapping 法の開発とその応用」

[口頭発表 3] (9:40-10:40) 座長: 河合健太郎 (摂南大薬)

2O-01 ○陳 露瑩<sup>1</sup>, 佐山美紗<sup>1</sup>, 尾谷優子<sup>1</sup>, 上水明治<sup>2</sup>, 井上飛鳥<sup>2</sup>, 青木淳賢<sup>2</sup>, 大和田智彦<sup>1</sup> (<sup>1</sup> 東大院薬, <sup>2</sup> 東北大院薬)

「LysoPS 受容体 P2Y10-リガンドの結合モデルの提唱と化合物による検証」

2O-02 ○黒崎宏太, 植沢芳広 (明治薬科大)

「変異原性および有害性発現経路に基づく肝がん誘発薬物の特徴解析」

2O-03 ○早川大地, 渡邊友里江, 合田浩明 (昭和大薬)

「高精度タンパク質-リガンド相互作用解析を目指した probe-based QM modeling 法の考案と検証」

[口頭発表 4] (11:00-12:00) 座長: 小田晃司 (小野薬品)

2O-04 ○千葉峻太郎<sup>1</sup>, 大田雅照<sup>1</sup>, 田部亜季<sup>2</sup>, 中木戸誠<sup>2</sup>, 津本浩平<sup>2,3</sup>, 奥野恭史<sup>1,4</sup> (<sup>1</sup> 理研 MIH, <sup>2</sup> 東大工, <sup>3</sup> 東大医科研, <sup>4</sup> 京大医学研)

「抗原・抗体複合体立体構造に基づく2アミノ酸同時変異戦略による新規抗体創製」

2O-05 ○原田俊幸<sup>1,2</sup>, 渡邊千鶴<sup>1</sup>, 森脇寛智<sup>1</sup>, 神坂紀久子<sup>1</sup>, 原田祐希<sup>1</sup>, 佐藤朋広<sup>1</sup>, 高谷大輔<sup>1</sup>, 本間光貴<sup>1</sup> (<sup>1</sup> 理研, <sup>2</sup> 住友化学)

「フラグメント分子軌道法と機械学習を用いた Aurora キナーゼ阻害剤の活性予測モデル構築」

2O-06 ○大川和史 (旭化成ファーマ)

「Fragment Molecular Orbital Method Applied to FXa Inhibitors」

[依頼講演] (12:00-12:30) 座長: 田上宇乃 (味の素)

IL-02 ○飯島 洋 (日大薬)

「創薬研究現場と構造活性相関: 実験屋からの retrospective, できれば perspective」

(12:30-13:30) 昼休み

[依頼講演](13:30-14:00) 座長：前田美紀(農研機構)

IL-03      ○赤松美紀(京大院農)  
「QSAR の始まり・現在・未来」

[口頭発表 5](14:00-15:00) 座長：早川大地(昭和大薬)

2O-07      ○福澤 薫(星薬科大薬)  
「FMO 法の相互作用抽出ツールとしての活用」

2O-08      ○上島仁<sup>1</sup>, 寺山 慧<sup>2</sup>, 大田雅照<sup>2</sup>, 本間光貴<sup>2</sup>(<sup>1</sup>システム計画研究所,<sup>2</sup>理研)  
「Recurrent Neural Networks と Monte Carlo Tree Search を利用した de novo 構造発生システム ChemTS」

2O-09      小池沙織, 中山智絵, 工藤龍希, 小滝綾子, 足立朋子, 中塚優実, ○西端芳彦(北里大薬)  
「合成容易性を考慮した de novo リガンド自動設計手法の構築」

[口頭発表 6](15:20-16:20) 座長：池田和由(慶應大薬)

2O-10      ○小田晃司(小野薬品工業)  
「自然言語処理技術を利用した可視化による薬物分子設計支援」

2O-11      ○WU MIAN<sup>1</sup>, 佐山美紗<sup>1</sup>, 佐藤薫<sup>2</sup>, 高橋華奈子<sup>2</sup>, 尾谷優子<sup>1</sup>, 大和田智彦<sup>1</sup>(<sup>1</sup>東大院薬,<sup>2</sup>医薬品食品衛生研)  
「内在性脂肪酸と脂肪酸アナログの立体配座の比較」

2O-12      ○前田美紀, 米澤朋起, 駒場朋美, 高橋みき子(農研機構)  
「3DMET リリース 3.1」

[特別講演](16:20-17:00) 座長：服部一成(塩野義製薬)

SL-04      ○中川好秋(京大院農)  
「リガンド-受容体複合体をもとにした農薬の分子設計と Hansch-Fujita 法による最適化」

[表彰式 ・ 閉会式] (17:00-17:20)

[ポスター発表] (1 日目) 奇数番号 14:00-15:00, 偶数番号 15:00-16:00

- 1P-01 ○浴本亨<sup>1</sup>, 湯浅千紗<sup>1</sup>, 山根努<sup>1</sup>, 池口満徳<sup>1,2</sup>(<sup>1</sup>横浜市大,<sup>2</sup>理研)  
「ホスホジエステラーゼファミリータンパク質における選択性のインシリコ研究」
- 1P-02 ○奥村政輝<sup>1</sup>, 中西伸介<sup>1</sup>, 西脇敬二<sup>1</sup>, 中村真也<sup>1</sup>, 大石真也<sup>2</sup>, 大野浩章<sup>2</sup>, 仲西功<sup>1</sup>(<sup>1</sup>近大薬,<sup>2</sup>京大薬)  
「Pyrazole 骨格を有する CK2 阻害剤の構造活性相関研究～窒素置換による物性・活性改善の検討～」
- 1P-03 ○河合健太郎<sup>1</sup>, 池田朱里<sup>2</sup>, 船越英資<sup>3</sup>, 荒木望嗣<sup>4</sup>, 馬彪<sup>5</sup>, 軽尾友紀子<sup>1</sup>, 樽井敦<sup>1</sup>, 佐藤和之<sup>1</sup>, 奥野恭史<sup>4</sup>, 表雅章<sup>1</sup>(<sup>1</sup>摂南大薬,<sup>2</sup>北里大生命研,<sup>3</sup>摂南大理工,<sup>4</sup>京大院薬,<sup>5</sup>FBRI 神戸)  
「新規 COX-2 選択的阻害剤の合成と構造活性相関」
- 1P-04 ○河津有貴<sup>1</sup>, 吉岡賢司<sup>1</sup>, 中川愛理<sup>1</sup>, 中村真也<sup>1</sup>, 西脇敬二<sup>1</sup>, 露口正人<sup>2</sup>, 木下誉富<sup>2</sup>, 仲西 功<sup>1</sup>(<sup>1</sup>近大薬,<sup>2</sup>阪府大院理)  
「プリン骨格を有する CK2 阻害剤の構造活性相関－微小な構造変換による結合様式の大きな変化－」
- 1P-05 ○佐藤秀行<sup>1</sup>, Jianxin Duan<sup>2</sup>, Steven Dixon<sup>3</sup>, Chris von Bargen<sup>3</sup>, Volodymyr Babin<sup>3</sup>, Steve Jerome<sup>3</sup>, Matt Repasky<sup>3</sup>(<sup>1</sup>シュレーディンガー,<sup>2</sup>Schrödinger GmbH,<sup>3</sup>Schrödinger Inc.)  
「GPU で実現する分子形状に基づく大規模 Ligand-based Virtual Screening」
- 1P-06 ○澤田敏彦<sup>1</sup>, 橋本智裕<sup>1</sup>, 和佐田裕昭<sup>1</sup>, 利部伸三<sup>2</sup>(<sup>1</sup>岐阜大地域,<sup>2</sup>岐阜大名誉)  
「Ames 変異原性予測ソフトウェア xenoBiotic」
- 1P-07 ○竹内隆博, 鎌田大史, 佐々木浩介, 宮野奈津美, 池田照美(帝人ファーマ)  
「創薬研究の生産性向上を目指したクロマト業務における効率化」
- 1P-08 ○中込泉, 桑原愛実, 山乙教之, 広野修一(北里大薬)  
「 $\beta$ -glucocerebrosidase に対する allosteric activator の結合様式の同定」
- 1P-09 ○中村真也, 西脇敬二, 田辺有香, 長岡綾, 仲西 功(近畿大薬)  
「Comparative Binding Energy 解析法を用いた Nek2 阻害剤の SBDD」
- 1P-10 ○馬場剛史<sup>1</sup>, 小甲裕一<sup>2</sup>, 佐藤美和<sup>2</sup>, 中川寛之<sup>2</sup>, 宮口郁子<sup>3</sup>, 馬彪<sup>4</sup>, 松本篤幸<sup>5</sup>, 徳久淳師<sup>5</sup>, 大田雅照<sup>5</sup>, 池口満徳<sup>5,6</sup>(<sup>1</sup>東レ,<sup>2</sup>三井情報,<sup>3</sup>田辺三菱製薬,<sup>4</sup>神戸医療産業都市推進機構,<sup>5</sup>理研,<sup>6</sup>横浜市大)  
「3D-CNN を活用したポケット予測に関する研究」
- 1P-11 ○東智也<sup>1</sup>, 吉田千紘<sup>1</sup>, 鉢呂佳史<sup>1</sup>, 中田千尋<sup>2,3</sup>, 八木拓哉<sup>2,3</sup>, 武智あづさ<sup>2,4</sup>, 原孝彦<sup>2,3,4</sup>, 牧 昌次郎<sup>1,5</sup>(<sup>1</sup>電通大院情報理工学,<sup>2</sup>都医学研・幹細胞,<sup>3</sup>東京医歯大院・医歯学総合,<sup>4</sup>首都大院・幹細胞制御学,<sup>5</sup>電通大・脳医工学研究センター)  
「急性 T リンパ芽球性白血病細胞に対する増殖抑制活性を向上させた化合物の創製」

- 1P-12 藤田駿明<sup>1</sup>, ○畑田峻<sup>1</sup>, 奥脇弘次<sup>1</sup>, 福澤薫<sup>2,3</sup>, 望月祐志<sup>1,3</sup>, 田中成典<sup>4</sup>, 古明地勇人<sup>5</sup>(<sup>1</sup>立教大理,<sup>2</sup>星薬科大薬,<sup>3</sup>東大生産研,<sup>4</sup>神戸大院シス情,<sup>5</sup>産総研)  
「構造揺らぎを考慮したリガンド-タンパク質の FMO 相互作用解析」
- 1P-13 ○富士寛文<sup>1</sup>, 川下理日人<sup>2</sup>(<sup>1</sup>近畿大院総合理工,<sup>2</sup>近畿大理工)  
「フラグメント分子軌道法を用いた HIV プロテアーゼ阻害剤複合体における結合自由エネルギーの予測」
- 1P-14 ○古濱彩子, 林岳彦, 山本裕史(国立環境研)  
「魚類生活初期段階(ELS)毒性予測のためのグローバル回帰モデルの開発と検証」
- 1P-15 ○真下忠彰<sup>1,2</sup>, 黒澤隆<sup>1,3</sup>, 中村寛則<sup>4</sup>, 福西快文<sup>1,5</sup>(<sup>1</sup>N2PC,<sup>2</sup>IMSBIO,<sup>3</sup>日立ソリューションズ東日本,<sup>4</sup>バイオモデリングリサーチ,<sup>5</sup>産総研 molprof)  
「機械学習による蛋白質-薬物の活性予測モデル式の開発とその精度」
- 1P-16 ○望月麻衣<sup>1</sup>, 福戸康平<sup>2</sup>, 田雨時<sup>2</sup>, 高木達也<sup>2</sup>(<sup>1</sup>阪大薬,<sup>2</sup>阪大院薬)  
「機械学習を用いた悪性症候群予測モデルの構築」
- 1P-17 ○山乙教之, 田野隆也, 広野修一(北里大薬)  
「in silico アミノ酸マッピング法と分子動力学計算を用いた PPI に重要な界面残基の予測」
- 1P-18 ○山田隆志, 広瀬明彦, 石田誠一, 笠松俊夫, 本間正充(国立衛研)  
「化学物質のヒト健康リスク評価に対する in silico アプローチの開発動向」
- 1P-19 ○米澤朋起<sup>1</sup>, 池田和由<sup>2</sup>(<sup>1</sup>ライフマティックス,<sup>2</sup>慶應大薬)  
「Ligand-based と Structure-based による活性予測の比較」
- 1P-20 ○田上宇乃<sup>1</sup>, 山田慧<sup>1</sup>, 中沢正和<sup>1</sup>, 松本佳代<sup>1</sup>, 本間啓介<sup>1</sup>, 森卓<sup>1</sup>, 松本凌<sup>1</sup>, 犀川和佳奈<sup>1</sup>, 北島誠司<sup>1</sup>, 広川貴次<sup>2</sup>(<sup>1</sup>味の素,<sup>2</sup>産総研)  
「甘味受容体 T1R2/T1R3 の活性増強物質 (Positive Allosteric Modulator:PAM) として機能する非天然ペプチドの創出」
- 1P-21 ○足立怜奈<sup>1</sup>, 釘屋敦基<sup>1</sup>, 松原祐佳<sup>1</sup>, 山村円香<sup>1</sup>, 伊原誠<sup>2</sup>, 赤松美紀<sup>3</sup>, 山内聡<sup>1</sup>, 西脇寿<sup>1</sup>(<sup>1</sup>愛媛大院農,<sup>2</sup>近大院農,<sup>3</sup>京大院農)  
「含フッ素置換基を有するイミダクロプリドニトロメチレン類縁体の生物活性と構造活性相関解析」
- 1P-22 ○A. B. Manggara<sup>1</sup>, Manabu Sugimoto<sup>1,2</sup>(<sup>1</sup>熊本大院自然科学,<sup>2</sup>熊本大院先端科学)  
「An Electronic-Structure Informatics Study on Toxicity of Alkylphenol to Tetrahymena pyriformis」
- 1P-23 ○井手尾俊宏<sup>1</sup>, 武田季詩子<sup>2</sup>, 古庄和也<sup>2</sup>, 石出愛美<sup>2</sup>, 杉本 学<sup>1-3</sup>(<sup>1</sup>熊本大院自然科学,<sup>2</sup>熊本大工,<sup>3</sup>熊本大院先端科学)  
「電子状態インフォマティクスを用いた精油の抗菌作用に関する構造活性相関解析」
- 1P-24 ○上西大介, 吉田智喜, 広野修一(北里大薬)  
「フラグメントマッピング法と水和サイト解析を用いた TRIM24 新規阻害剤のバーチャル

スクリーニング」

- 1P-25 ○宇田康佑, 小澤新一郎, 広野修一(北里大薬)  
「In silico フラグメントマッピング法によるインフルエンザ RNA ポリメラーゼのサブユニット間相互作用阻害剤の探索」
- 1P-26 ○江崎剛史<sup>1</sup>, 紅林亘<sup>1</sup>, 山川雄也<sup>1</sup>, 坂根巖<sup>2</sup>, 松井秀俊<sup>2,3</sup>(<sup>1</sup> 滋賀大 DS センター, <sup>2</sup> 伊藤園, <sup>3</sup> 滋賀大 DS 学部)  
「膜透過性予測に重要なパラメータの提案に向けた非線形スプース正則法の適用」
- 1P-27 ○遠藤智史<sup>1</sup>, 瀬川仁<sup>1</sup>, 小栗弘成<sup>1</sup>, 夏爽<sup>2</sup>, 胡大イ<sup>2</sup>, 入江克雅<sup>3</sup>, 藤井晋也<sup>4</sup>, 合田浩明<sup>5</sup>, 松川卓生<sup>6</sup>, 藤本直浩<sup>6</sup>, 中山敏幸<sup>7</sup>, 豊岡尚樹<sup>2</sup>, 松永俊之<sup>8</sup>, 五十里彰<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup> 岐阜薬大生化学, <sup>2</sup> 富山大院, <sup>3</sup> 名大 CeSPI, <sup>4</sup> 東京医科歯科大生材研, <sup>5</sup> 昭和大薬, <sup>6</sup> 産業医大泌尿器科, <sup>7</sup> 産業医大第二病理, <sup>8</sup> 岐阜薬大 EGPS)  
「アンドロゲン合成酵素を標的とした新規去勢抵抗性前立腺がん治療薬の開発」
- 1P-28 ○小澤新一郎, 北村祐万, 広野修一(北里大薬)  
「Rac1-GEF 間相互作用阻害剤の計算機的フラグメントベース創薬」
- 1P-29 ○加藤紘一<sup>1</sup>, 仲吉朝希<sup>2</sup>, 栗本英治<sup>2</sup>, 小田彰史<sup>2,3</sup>(<sup>1</sup> 金城学院大薬, <sup>2</sup> 名城大薬, <sup>3</sup> 阪大蛋白質研)  
「アスパラギン残基の非酵素的な脱アミド化機構における主鎖構造および触媒分子の影響」
- 1P-30 ○清田泰臣, 竹田-志鷹真由子(北里大薬)  
「水和構造情報を基にしたタンパク質立体構造評価スコアの開発」
- 1P-31 ○工藤崇文<sup>1</sup>, 浴本亨<sup>1</sup>, 山根努<sup>1</sup>, 池口満徳<sup>1</sup>(<sup>1</sup> 横浜市大生命医科学, <sup>2</sup> 理研医科学イノベ)  
「拡張アンサンブル法を用いたビタミン D 受容体のアゴニスト/アンタゴニスト活性調節機構の研究」
- 1P-32 ○小林慎平, 清田泰臣, 竹田-志鷹真由子(北里大薬)  
「タンパク質複合体界面における水分子を考慮したアミノ酸残基間コンタクトの統計的解析」
- 1P-33 ○清水祐吾, 大澤匡範, 池田和由(慶應大薬)  
「生物活性情報を利用したコアラライブラリー構築法の開発」
- 1P-34 ○関祐哉<sup>1</sup>, 加藤司<sup>1</sup>, 安崎聡<sup>2</sup>, 田中成典<sup>2</sup>, 古石誉之<sup>1</sup>, 福澤薫<sup>1</sup>, 米持悦生<sup>1</sup>(<sup>1</sup> 星薬科大, <sup>2</sup> 神戸大院)  
「FMO 法による ER  $\beta$  とサブタイプ選択的リガンドとの相互作用解析」
- 1P-35 ○高谷大輔, 渡邊千鶴, 神坂紀久子, 本間光貴(理研 BDR)  
「FMO DB の開発と相互作用データの適用に関する研究」
- 1P-36 ○津島悠, 山乙教之, 広野修一(北里大薬)  
「in silico アミノ酸残基マッピング法による PPI フラグメントペプチドの結合様式予測」

- 1P-37 ○土居英男, 高橋和義, 青柳岳司(産総研機能材料)  
「局所的な分子記述子を用いた機械学習に基づく電荷の予測」
- 1P-38 ○仲吉朝希<sup>1,2</sup>, 加藤紘一<sup>1,3</sup>, 高橋央宜<sup>4</sup>, 栗本英治<sup>1</sup>, 小田彰史<sup>1,2,5</sup>(<sup>1</sup>名城大院薬,  
<sup>2</sup>金沢大院医薬保,<sup>3</sup>金城学院大薬,<sup>4</sup>東北医薬大薬,<sup>5</sup>阪大蛋白研)  
「水 2 分子の触媒するアスパラギン酸残基のスクシンイミド形成機構の解析」
- 1P-39 ○望月大愛, 吉田智喜, 山乙教之, 広野修一(北里大薬)  
「非ペプチド化を目指した結合部位類似性に基づくアミノ酸バイオアイソスターの探索」
- 1P-40 ○森義治, 竹田-志鷹真由子(北里大薬)  
「スレオニン-tRNA リガーゼにおけるリガンド相互作用の *in silico* 解析」
- 1P-41 ○幸瞳, 保田真友子, 本間光貴(理研 BDR)  
「各創薬段階における忌避構造出現傾向の解析」
- 1P-42 ○吉田智喜, 広野修一(北里大薬)  
「水和サイト解析を利用した化合物スクリーニング条件の検討」
- 1P-43 ○吉留崇<sup>1</sup>, 大田雅照<sup>2</sup>, 池口満徳<sup>3</sup>(<sup>1</sup>東北大院工,<sup>2</sup>理研,<sup>3</sup>横浜市大生命医科学)  
「溶液理論を用いたタンパク質-リガンド複合体における水和の大規模解析」
- 1P-44 古庄和也<sup>1</sup>, 武田季詩子<sup>1</sup>, 井手尾俊宏<sup>2</sup>, 杉本 学<sup>1-3</sup>(<sup>1</sup>熊本大工,<sup>2</sup>熊本大院自然科学,<sup>3</sup>熊本大院先端科学)  
「電子状態データベースへの知識情報集積とその応用」
- 1P-45 Francois Berenger, Yoshihiro Yamanishi (Kyushu Inst. Technol.)  
「The Distance-Based Boolean Applicability Domain for Classification of HTS Data」