

実施体制：研究チームと研究内容

IT現場（技術連携）

理研MIH 理研AIP
 神戸FBIR 医薬基盤研・AIセンター
 KBDD LINC
 ストックホルム大学
 スウェーデン王立工科大学

臨床現場（臨床との連携）

AMED臨床ゲノム情報データベース事業・MGenD
 国立がん研究センター 国立国際医療センター
 がん研究会・がん化学療法センター 愛知県がんセンター研究所
 京都大学大学附属病院 佐賀大学医・附属病院がんセンター
 慶應義塾大学病院 日本ベーリンガーインゲルハイム
 東京医科歯科大医・附属病院 カリフォルニア大学サンディエゴ校

製薬現場（産学連携）

LINC 京都大学・医
 KBDD 山口大学・医
 FMODD 筑波大学
 製薬・IT企業110社以上
 スタンフォード大学・SPARK Global

AI・データサイエンス連携
 計算技術連携

疾患ゲノム情報提供

臨床応用, 実験検証

創薬応用, 実験検証

④ AI・データサイエンス・社会実装基盤

AI-シミュレーション融合【理研AIP・寺山】

AI技術による分子設計の高精度化・MD計算に対する最適化アルゴリズム適用による効率化

疾患ゲノム構造データベース【京大医・鎌田】

疾患関連変異とタンパク質立体構造の集約および解析結果の公開

創薬ビッグデータ統合システム【理研MIH・本間】

各創薬基盤と「富岳」の連携プラットフォーム構築および産業界との連携および「富岳」の利用促進

① 分子病態解析

動的構造機能解析【横浜市立・池口】

MSMを用いた変異の導入による構造ダイナミクス変化解析

希少疾患タンパク質安定性評価 200構造
 キナーゼ等・長時間ダイナミクス 2構造

タンパク質活性予測【京大理・林】

QM-MMによるキナーゼのリン酸化反応解析・共有結合型阻害剤の結合反応性の計算

キナーゼリン酸化反応 10構造
 共有結合型阻害剤反応 12構造

② 薬剤反応性推定

結合自由エネルギー計算【京大医・奥野】

MP-CAFE法やFEP法による各種変異に対する非共有結合型阻害剤やATPとの結合自由エネルギー推定

キナーゼ-ATP-阻害剤 800構造

結合経路・ポーズ推定【理研BDR・杉田】

gREST/RUESによるキナーゼと阻害剤の結合経路推定・ポーズ推定

キナーゼ-阻害剤 10構造
 キナーゼ-基質ペプチド 5構造

結合速度論解析【東工大・北尾】

PACS-MD・MSMによるキナーゼと阻害剤の結合過程計算

キナーゼ-阻害剤 10構造
 キナーゼ-基質ペプチド 10構造

③ 薬剤分子設計

低分子デザイン【産総研・広川】

創薬ビッグデータ統合システムを用いたドラッグデザイン

薬剤耐性キナーゼ 500構造
 希少疾患関連タンパク質 500構造

抗体医薬デザイン【東大先端研・山下】

PD1抗体など有名な抗体デザイン

抗原抗体 30構造