

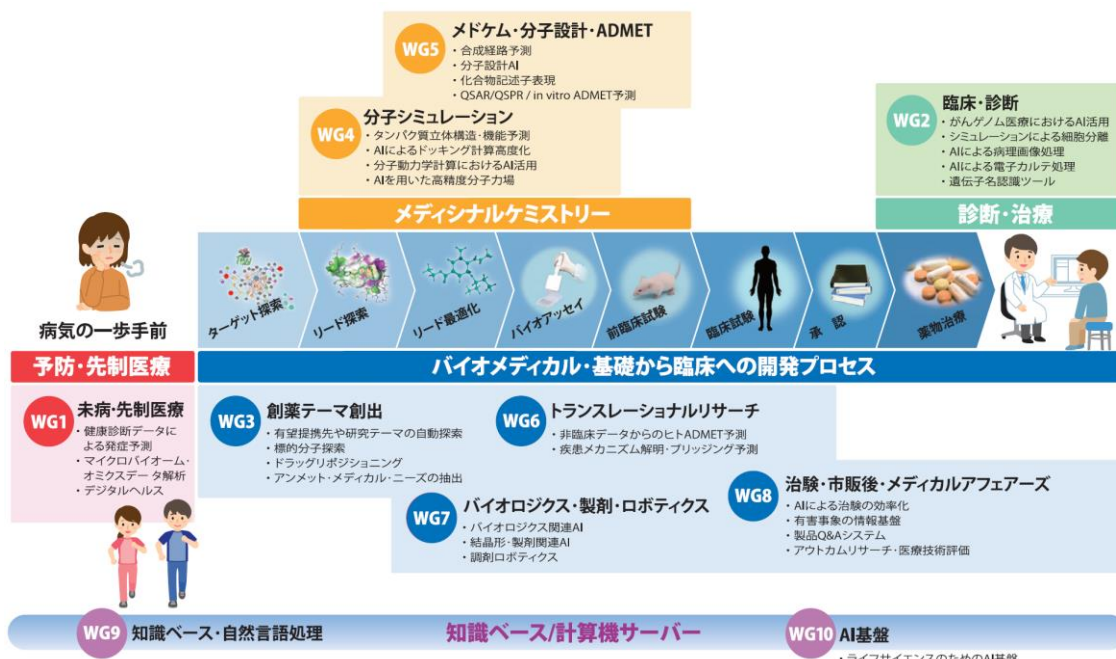
## ライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)における創薬医療 AI の開発 Development of drug discovery and medical AI in LINC

**開催趣旨：**

ライフインテリジェンスコンソーシアム (LINC) では、製薬・化学・食品・医療・ヘルスケア関連のライフサイエンス分野のための人工知能 (AI) ならびにビッグデータの解析手法を開発することで、産業振興、国民の健康寿命の延伸、及び生活の質の向上を目指すことを目的として、2016年11月に発足した。2017年7月からはテーマを設定して活動を開始 (活動期限2020年9月)、これまで、39のプロジェクトが活動を行っている。現在、製薬企業等のライフ系企業52社、IT系企業39社、アカデミア研究機関11機関、550名以上の研究者が参画している。

本セッションでは、LINCの活動について、特に本CBI学会2019年大会に関連するトピックを集めて紹介する。

1. **イントロダクション** 理化学研究所 本間 光貴
2. **PJ11 タンパク質立体構造・機能予測**  
3D CNNによる結合ポケット予測、及び構造予測 AI への展開
3. **PJ12 AIによるドッキング計算高度化**  
3D CNNによるドッキングポーズ・活性予測
4. **京大(PJ15-2) 合成経路予測**  
GCN 記述子とモンテカルロ木探索を用いた合成経路予測
5. **PJ16 分子設計 AI**  
モンテカルロ木探索とRNNによる新規構造発生法 ChemTS の検証
6. **PJ18 QSAR/QSPR/in vitro ADMET 予測**  
**PJ19 非臨床データからのヒト ADMET 予測**  
ディープテンソルを用いた薬物動態・毒性・トランスレーショナル予測



## 体制

- 【代表】 奥野恭史(京都大学/理化学研究所)
- 【副代表】 水口賢司(医薬基盤・健康・栄養研究所)  
本間光貴(理化学研究所)
- 【事務局長】 江口至洋(理化学研究所)
- 【事務局次長】 小柳智義(京都大学)  
志水隆一(都市活力研究所)  
進藤順紀(医薬基盤・健康・栄養研究所)  
堀 洋(理化学研究所)
- 【事務局】 京都大学 大学院医学研究科  
人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野  
(国研)理化学研究所 健康“生き生き”羅針盤  
リサーチコンプレックス推進プログラム  
(国研)医薬基盤・健康・栄養研究所  
(公財)都市活力研究所

