

AI・データ駆動型研究開発に対応したソリューションのご紹介

株式会社富士通九州システムズ

日時：2020年10月28日（水）13:00 – 14:30

研究開発支援システムの開発およびAMED事業「創薬支援インフォマティクスシステム構築」の 取組みについて

松下 まゆみ（株式会社富士通九州システムズ）

弊社では創薬・化学・材料分野の研究開発支援システムの開発から販売までを行っております。

AMED 事業に参画する事で、自社開発のみならずプロジェクト内のノウハウや専門性を反映した製品開発を進めております。弊社製品の中から、「AI 創薬基盤(仮称)」、「計算化学統合プラットフォーム SCIGRESS」をご紹介します。

AI創薬基盤（仮称）のご紹介

古賀 裕美（株式会社富士通九州システムズ）

国立研究開発法人日本医療研究開発機構が、「オールジャパンでの医薬品創出プロジェクト」の一環として、創薬支援ネットワークによる支援機能を強化するために、2015年度から5か年の計画で「創薬支援推進事業—創薬支援インフォマティクスシステム構築—」が実施されました。当社はこの研究成果の一部を活用し、薬物動態と毒性を中心としたインシリコの統合解析プラットフォーム（データベース、モデル構築、予測機能から成るシステム）を構築し、2021年1月に商用版としてリリースします。

本セッションでは製品リリースに先駆けて、本製品の概要や、医薬基盤・健康・栄養研究所、理化学研究所、明治薬科大学の各研究機関において構築されたモデル、および国内製薬企業（7社）からの協力を得て構築されたモデル、自社データを活用した予測モデル構築手順についてご紹介します。

SCIGRESS を活用したマテリアルズ・インフォマティクスへの取り組み

石川 慧（株式会社富士通九州システムズ）

SCIGRESS は原子・分子レベルの微細な挙動や性質を解析するシミュレーション・ソフトウェアです。低分子、高分子、結晶、アモルファスなど多岐にわたるモデリング機能や、分子軌道法、分子動力学法、密度汎関数法など様々な計算化学の手法を搭載し、新材料、新素材の研究開発を支援します。

本セッションでは、幅広い適応分野に対応可能な SCIGRESS をマテリアルズ・インフォマティクスにどのように活用できるのか、その取り組みについてご紹介します。

<開発元・お問い合わせ先>

株式会社 富士通九州システムズ 未来社会ソリューション本部 ソーシャル ICT ソリューション部

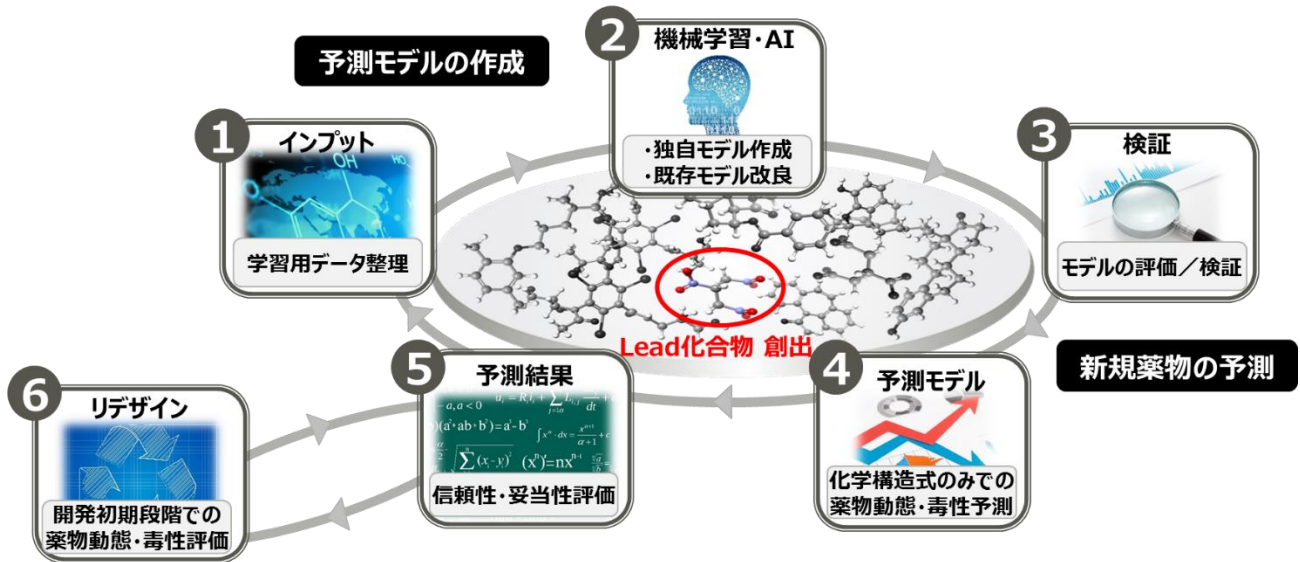
E-mail : fjqs-ccs@cs.jp.fujitsu.com

URL : <http://www.fujitsu.com/jp/group/kyushu/solutions/industry/lifescience/>



AI 創薬基盤 (仮称)

薬物動態、毒性の予測により、効率的に候補化合物を絞り込みます。また、化学構造式から予測できるため、創薬初期段階から安全性・薬物動態を評価でき、製品開発のスピードアップ、安全性を考慮した製品開発を支援します。



計算化学統合プラットフォーム SCIGRESS

原子・分子レベルの微細な挙動や性質を解析するシミュレーション・ソフトウェアです。

分子力学法、非経験的分子軌道法、半経験的分子軌道法、密度汎関数法、分子動力学法、第一原理計算など、様々な計算化学の手法を搭載し、新材料、新素材の研究開発を強力に支援します。

- 実験研究者でも簡単 GUI で手軽に計算が可能。使いやすさと高機能、拡張性を実現
 - 富士通が独自開発、30年以上の開発実績
 - 日本人研究者のための日本語 GUI & 日本語サポート
 - 簡単で直観的な GUI と広範な機能で、幅広い分子シミュレーションを容易に実現

SCIGRESSの機能とサポート環境:

- モデリング機能 共有コンポーネント**
- 計算エンジン 富士通**
 - MD-ME
 - MO-G, MO-S
 - Gaussian
- ソフトウェアベンダ**
 - MOPAC
 - ADF
 - CONFLEX
- アカデミア・オープンコミュニティ**
 - GAMESS
 - LAMMPS
 - PHASE/0
 - Quantum ESPRESSO

主要な機能領域:

- 試薬・色素**: HOMO/LUMO計算、紫外-可視スペクトル、化学反応解析
- ポリマー**: ガラス転移点、屈折率、弾性率
- 半導体**: バンド計算、状態密度計算、欠陥、結晶成長
- 電池**: イオン伝導・拡散、電解質の分子間相互作用、電極反応
- 触媒**: 界面反応機構、表面吸着、酸化還元
- 液晶**: 液晶セルビルダー、分子配向、相変化