

AMED/BINDS インシリコ解析ユニットにおける創薬支援研究
Research activities for supporting drug discovery by in-silico unit of BINDS
(AMED)

開催趣旨:

令和4年4月より AMED のプロジェクト BINDS (生命科学・創薬研究支援基盤事業) 事業が開始されました。本プロジェクトでは、優れた研究成果を創薬研究などの実用化研究開発に繋げることを目的に、6つの研究領域別ユニット(構造活性、発現・機能解析、ヒット化合物創出、モダリティ探索、薬効・安全性評価、インシリコ解析)から構成され、最先端の生命科学・創薬研究を推進するための高度な研究支援を行っています。

本セッションでは、シミュレーション、AI、インシリコスクリーニングやデータ駆動型生命科学等による支援と高度化を行うインシリコ解析ユニット8課題の中から、4課題について、課題代表者より、インシリコユニットの支援・高度化研究の成果を発表していただきます。

モデレーター: 広川 貴次 (Takatsugu Hirokawa)
筑波大学医学医療系 (Faculty of Medicine, University of Tsukuba)

1. 構造生物学データを活用し AI と連携した分子動力学シミュレーション研究
池口 満徳 (Mitsunori Ikeguchi)
横浜市立大学 生命医科学研究科 (Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University)
2. スーパーコンピュータ資源及び大規模シミュレーションと AI に基づく創薬・生命科学の支援
関嶋 政和 (Masakazu Sekijima)
東京工業大学 情報理工学院 (Department of Computer Science, Tokyo Institute of Technology)
3. ライフサイエンス研究加速のためのバイオインフォマティクス研究
富井 健太郎 (Kentaro Tomii)
産業技術総合研究所 人工知能研究センター (Artificial Intelligence Research Center, AIST)
4. AI と FMO 法を融合したインシリコスクリーニングと分子間相互作用解析支援
本間 光貴 (Teruki Honma)
理化学研究所 生命機能科学研究センター (RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research)