「富岳」成果創出加速プログラム ②国民の生命・財産を守る取組の強化の領域

「プレシジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進」

課題責任者:奥野恭史

■ 学会等における口頭・ポスター発表(国際会議)

| No. | 発表した成果(発表題目) | 発表者氏名 | 発表した場所(学会名等) | 発表した時期 | 国内外の別 | 開催地 |
|-----|---|--|---|----------|-------|-----------------------------|
| 1 | | Rei Ashine, Mayumi Kamada, Masahiko Nakatsui, Ryosuke Kojima, Yasushi Okuno | American Society of Human Genetics (ASHG) 2020 Annual Meeting | 2020年10月 | 国際 | Online |
| 2 | The effect of conformational flexibility of protein-ligand binding free energy computation and its significance in predicting mutation-induced drug sensitivity changes in oncogenic kinases. | Araki M and Okuno Y | Fall 2020 ACS National Meeting | 2020年8月 | 国際 | Online |
| 3 | Protein-drug binding free energy computation incorporating protein flexibility and its significance in predicting mutation-induced drug resistance in oncogenic kinases. | Araki M and Okuno Y | Spring 2020 ACS National Meeting | 2020年4月 | 国際 | Telluride, Co, USA (online) |
| 4 | Molecular dynamics simulations reveal the protein-protein interaction mechanism | Takefumi Yamashita | 16th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (CC symposium of ICCMSE 2020) | 2020年9月 | 国際 | online |
| 5 | Relationship between the void formation and stress change during the deformation of epoxy resin | Naoyuki Shoji and Takefumi Yamashita | 16th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (CC symposium of ICCMSE 2020) | 2020年9月 | 国際 | Online |
| 6 | Conformational flexibility and stability of SARS-CoV-2 spike protein in solution | Yuji Sugita | ACS Spring 2021 | 2021年4月 | 国際 | online |
| 7 | Intrinsic Conformational Flexibility of SARS-CoV-2 Spike Protein Simulated on Fugaku | Yuji Sugita | 2021 R-CCS Symposium | 2021年2月 | 国際 | Online, Japan |
| 8 | Multi-scale MD simulations using GENESIS on Fugaku | Yuji Sugita | The 1st Fugaku Bio-supercomputing Workshop on Cellular-Scale Molecular Dynamics Simulations | 2021年1月 | 国際 | Kobe, Japan |
| 9 | Use of enhanced conformational sampling for the analysis of protein-ligand binding processes | Yuji Sugita | Virtual Workshop "Biomolecular Interactions in Cellular Environments" in Telluride Science Research Center | 2020年8月 | 国際 | Online |
| 10 | Replica-exchange simulations on the conformational dynamics of spike protein on the surface of SARS-CoV-2 | Yuji Sugita | Molecular Basis of Proteinopathies | 2021年2月 | 国際 | Virtual, USA |

| Developments and Applications of Free-Energy Analysis for Protein-Ligand Binding | r Hiraku Oshima | RIKEN BDR Symposium 2021 | 2021年3月 | 国際 | online |
|--|--------------------|--------------------------|---------|----|--------|
|--|--------------------|--------------------------|---------|----|--------|

■ 学会等における口頭・ポスター発表(国内学会)

| No. | 発表した成果(発表題目) | 発表者氏名 | 発表した場所(学会名等) | 発表した時期 | 国内外の別 | 開催地 |
|-----|---|---|--------------------------------------|---------|-------|---------------|
| 1 | 3D-RISM-AI: Prediction of protein-ligand binding free energy based on machine learning using 3D-RISM | Kazu Ohsaki, Toru Ekimoto, Tsutomu Yamane, Mitsunori Ikeguchi | 第20回日本蛋白質科学会年会(新型コロナウイルスのため要旨のみ) | 2020年6月 | 国内 | Japan(Online) |
| 2 | AI・シミュレーションによる薬効・毒性予測 | 奥野恭史 | 第47回日本毒性学会学術年会シンポジウム | 2020年6月 | 国内 | オンライン |
| | Comparison of molecular dynamics of cyclosporin A and cyclosporin E | Akari Ito, Tsutomu Yamane, Toru Ekimoto, Mitsunori Ikeguchi | 第20回日本蛋白質科学会年会 (新型コロナウイルスのため要旨のみ) | 2020年6月 | 国内 | Japan(Online) |
| 4 | Comprehensive analysis of the hydration of small molecule binding sites in ligand-free protein structures: 3D-RISM approach | Takashi Yoshidome, Mitsunori Ikeguchi, Masateru Ohta | 第20回日本蛋白質科学会年会(新型コロナウイルスのため要旨のみ) | 2020年6月 | 国内 | Japan(Online) |
| 5 | Elucidation of interaction between neurotrophin receptor TrkAd5 and its binding peptide | Maho Takahashi, Toru Ekimoto, Tsutomu Yamane Rika Suzuki, Hideo Takahashi, Mitsunori Ikeguchi | 第20回日本蛋白質科学会年会(新型コロ ナウイルスのため要旨のみ) | 2020年6月 | 国内 | Japan(Online) |
| 6 | Regulation mechanism of agonist/antagonist activities of vitamin D receptor elucidated by generalized ensemble method | Toru Ekimoto, Takafumi Kudo, Tsutomu Yamane, Mitsunori Ikeguchi | 第20回日本蛋白質科学会年会(新型コロナウイルスのため要旨のみ) | 2020年6月 | 国内 | Japan(Online) |
| | Structural basis for the switching of binding partners by Ser298 phosphorylation in UHRF1 | Satomi Kori, Tomohiro Jimenji, Toru Ekimoto, Miwa Sato, Fumie Kusano, Takashi Oda, Motoko Unoki, Mitsunori Ikeguchi, Kyohei Arita | 第20回日本蛋白質科学会年会(新型コロナウイルスのため要旨のみ) | 2020年6月 | 国内 | Japan(Online) |
| 8 | Developments and applications of generalized-ensemble methods for free-energy analysis of protein-ligand binding | 尾嶋拓 | 第20回日本蛋白質科学会年会 | 2020年7月 | 国内 | 日本 |
| 9 | Protein-protein complex dissociation simulated by Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics | Yoshiki MIyazawa, Dun P. Tran, Kazuhiro Takemura, Akio Kitao | 第20回日本蛋白質科学会年会 | 2020年7月 | 国内 | Oniine, Japan |
| | Simulating the association/dissociation process of flexible protein complexes | Tran P. Duy, Akio Kitao | 第20回日本蛋白質科学会年会 | 2020年7月 | 国内 | Online, Japan |
| 11 | Unguided Binding MD of Protein-Protein Complexes by PPI- ColDock | Kazuhiro Takemura, Akio Kitao | 第20回日本蛋白質科学会年会 | 2020年7月 | 国内 | Online, Japan |

| Online, Japan Online, Japan Online, Japan Online Online |
|---|
| Online,Japan Online |
| Online |
| |
| Online |
| |
| オンライン |
| 日本 |
| オンライン |
| 日本 (オンライ ン) |
| online |
| オンライン |
| オンライン |
| Online |
| オンライン |
| オンライン |
| |

| 27 | シクロスポリンAのCHARMM力場の開発 | 山根努,浴本亨,池口満徳 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 (オンライ ン開催) |
|----|---|---|--|----------|----|------------------|
| 28 | スパコンを用いたタンパク質-化合物結合親和性の高精度 予測と医療・創薬への応用 | 荒木望嗣, 奥野恭史 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | オンライン |
| 29 | スパコンを用いたタンパク質-化合物結合親和性の高精 度予測と医療・創薬への応用 | 荒木望嗣, 奥野恭史 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 |
| 30 | スーパーコンピュータ・AIが拓く創薬の未来 | 奥野恭史 | Life Science Startup Ecosystem | 2020年12月 | 国内 | オンライン |
| 31 | ディープラーニングを用いたタンパク質水和分布予測法 の研究 | 河間光祐,吉留崇,池口満徳,大田雅照 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 (オンライ ン開催) |
| 32 | ニューロトロフィン受容体TrkAd5と結合ペプチド間の相 互作用様式の解明 | 髙橋真帆, 浴本亨, 鈴木里佳, 山根努(理研 MIH), 高橋栄夫, 池口満徳 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 (オンライ ン開催) |
| 33 | 中分子シクロスポリンAとシクロスポリンEの分子ダイナ ミクスの比較 | 伊藤朱里, 浴本亨, 山根努, 池口満徳 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 (オンライ ン開催) |
| 34 | 分子動力学計算によるp53-C 末端部位のDNA 結合機構の 解明 | 平悠太、Tran Duy、北尾彰朗 | 第34回分子シミュレーション討論会 | 2020年12月 | 国内 | オンライン |
| 35 | 幾何学的相互作用解析と機械学習による抗原一抗体複合 体側鎖モデル構造妥当性予測 | 千葉峻太朗,小甲裕一,野沢優翼,柳田駿介,佐藤美和,池口満徳,大田雅照 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 (オンライン開催) |
| 36 | 日本人疾患バリアントデータベースMGeND | 中津井雅彦,鎌田真由美 | 第43回分子生物学会 企画フォーラム「ゲ ノム研究と医療をつなぐデータベース」 | 2020年12月 | 国内 | オンライン |
| 37 | 機械学習を用いた3D-RISMベースの結合自由エネルギー 予測 | 大崎和,浴本亨,山根努,池口満徳 | 第48回構造活性相関シンポジウム | 2020年12月 | 国内 | 日本 (オンライ ン開催) |
| 38 | Dynamics of Close-Open State of Candida antarctica Lipase B Obtained by Parallel Cascade Molecular Dynamics Simulation and The Markov State Model | Wijaya Tegar Nurwahyu, Akio Kitao | 第10回日本生物物理学会関東支部会 | 2021年3月 | 国内 | online |
| 39 | 「プレシジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ 統合システムの推進」 | 奥野恭史,荒木望嗣,鎌田真由美 | 富岳の創薬活用に向けたワークショップ | 2021年3月 | 国内 | オンライン |
| 40 | 「産学連携コンソーシアムLINCから観たAI創薬の現状と 未来」 | 奥野恭史 | 知的財産戦略ネットワーク講演会 医療 AI 「AI創薬について」〜Aishリーズ パート2〜 | 2021年3月 | 国内 | オンライン |

| 41 | 抗原-抗体界面における塩橋安定性の理論的解析 | 山下雄史 | 第1回生体分子シミュレーション・モデリング研究会 | 2021年3月 | 国内 | Online |
|----|---|----------------|---------------------------------------|---------|----|--------------|
| 42 | 新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測 | 杉田有治 | HPCIフォーラム | 2021年3月 | 国内 | オンライン、日 本 |
| 43 | GENESIS とCHARMM-GUI を用いたリガンド結合自由エネルギー計算 | 尾嶋拓,李秀栄,杉田有治 | 第21回日本蛋白質科学会年会 | 2021年6月 | 国内 | オンライン |
| 44 | 「医薬プロセス最適化プラットフォーム開発の現状と今 後」 | 奥野恭史 | 理化学研究所 医科学イノベーションハ ブ推進プログラム シンポジウム | 2021年7月 | 国内 | オンライン |
| 45 | GENESIS とCHARMM-GUI を用いたリガンド結合自由エネルギー計算 | 尾嶋拓, 李秀栄, 杉田有治 | 第21回日本蛋白質科学会年会 | 2021年6月 | 国内 | オンライン |

■ 学会誌・雑誌等における論文掲載

| No. | 掲載した論文(発表題目) | 発表者氏名 | 発表した場所(学会誌・雑誌名等) | 発表した時期 | 国際共著 (〇を記入) |
|-----|---|---|---|----------|----------------|
| 1 | Edge expansion parallel cascade selection molecular dynamics simulation for investigating large-amplitude collective motions o proteins | Takaba, Kenichiro, Takaba, Kenichiro, Tran, Duy Phuoc; Kitao, Akio | JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS,Vol.152(2020) | 2020年6月 | |
| 2 | Prediction of Protein-Ligand Binding Pose and Affinity Using the gREST+FEP Method | Hiraku Oshima, Suyong Re, Yuji Sugita | J. Chem. Inf. Model. Vol. 60, 5382-5394 (2020) | 2020年7月 | |
| 3 | CHARMM-GUI Free Energy Calculator for Absolute and Relative Ligand Solvation and Binding Free Energy Simulations | Seonghoon Kim, Hiraku Oshima, Han Zhang, Nathan R. Kern, Suyong Re, Jumin Lee, Benoit Roux, Yuji Sugita, Wei Jiang, Wonpil Im | J. Chem. Theory Comput. 2020, 16, 7207-7218 | 2020年10月 | 0 |
| 4 | Regulation of caveolae through cholesterol-depletion-dependent tubulation mediated by PACSIN2 | Aini Gusmira, Kazuhiro Takemura, Shin Yong Lee. Takehiko Inaba, Kyoko Hanawa-Suetsugu, Kayoko Oono-Yakura, Kazuma Yasuhara, Akio Kitao, Shiro Suetsugu | | 2020年10月 | |
| 5 | Group-based evaluation of temperature and pressure for molecular dynamics simulation with a large time step | Jaewoon Jung, Yuji Sugita | The Journal of Chemical Physics, Vol. 153, 234115 (2020) | 2020年12月 | |
| 6 | Discovery of natural TRPA1 activators through pharmacophore- based virtual screening and a biological assay | Iwata, H., Kanda, N., Araki, M., Sagae, Y., Masuda, K., Okuno, Y. | Bioorg Med Chem Lett. 2021 Jan 1;31:127639 | 2021年1月 | |
| 7 | Imidazolinium-based Multiblock Amphiphile as Transmembrane Anion Transporter | Miki Mori, Kohei Sato, Toru Ekimoto, Shinichi Okumura, Mitsunori Ikeguchi, Kazuhito V. Tabata, Hiroyuki Noji, Kazushi Kinbara | Chemistry-An Asian Journal, Vol.16, 2, 147- 157 (2021) | 2021年1月 | |

| 8 | Environmental effects on salt bridge stability in the protein-protein interface: The case of hen egg-white lysozyme and its antibody, HyHEL-10 | Ryo Okajima, Shuichi Hiraoka, Takefumi Yamashita | J. Phys. Chem. B 125, 1542—1549 (2021) | 2021年2月 | |
|----|--|---|---|----------|---|
| 9 | Extraction of protein dynamics information from cryo-EM maps using deep learning | Matsumoto S, Ishida S, Araki M, Kato T, Terayama K, Okuno Y | Nature Machine Intelligence volume 3, pages 153 — 160(2021) | 2021年2月 | |
| 10 | Gilteritinib overcomes lorlatinib resistance in ALK-rearranged cancer | Mizuta H, Okada K, Araki M, Adachi J, Takemoto A, Kutkowska J, Maruyama K, Yanagitani N, Ohhara T, Watanabe K, Tamai K, Friboulet L, Katayama K, Ma B, Sasakura Y, Sagae Y, Kukimoto-Niino M, Shirouzu M, Takagi S, Simizu S, Nishio M, Okuno Y, Fujita N, and Katayama R | Nature Communications volume 12, Article number: 1261 (2021) | 2021年2月 | |
| 11 | New parallel computing algorithm of molecular dynamics for extremely huge scale biological systems | Jaewoon Jung, Chigusa Kobayashi, Cheng Tan, Akiyoshi KUroda, Kazuo Minami, Yutaka Ishikawa, Kento Kasahara, Yuji Sugita, Shigeru Ishiduki, Tatsuo Nishiki, Hikaru Inoue, Michael Feig | Journal of Computational Chemistry, Vol. 42, 4, 231-241(2021) | 2021年2月 | |
| 12 | Delineating the conformational landscape of the adenosine A2A receptor during G protein coupling | Shuya Kate Huang, Aditya Pandey, Duy Phuoc Tran, Nicolas L. Villanueva, Akio Kitao, Roger K. Sunahara, Adnan Sljoka, R. Scott Prosser | Cell, Vol.184, pp.1884-1894.e14 (2021) | 2021年3月 | 0 |
| 13 | Modification and Validation of the DREIDING Force Field for Molecular Liquid Simulations (DREIDING-UT) | Kohei Sasaki, Takefumi Yamashita | J. Chem. Inf. Model., 61, 1172—1179 (2021). | 2021/3/1 | |
| 14 | Novel Resistance Mechanisms Including L1196Q, P1094H, and R1248_D1249 Insertion in Three Patients With NSCLC After ALK Tyrosine Kinase Inhibitor Treatment | Furuta H, Araki M, Masago K, Sagae Y, Fujita S, Seto K, Shimizu J, Horio Y, Sasaki E, Hosoda W, Katayama R, Okuno Y, Hida T | J Thorac Oncol. 16(3):477-482 (2021) | 2021/3/1 | |
| 15 | Relationship Between Void Formation and Stress Change During Deformation of Epoxy Resin | Naoyuki Shoji, Takefumi Yamashita | AIP Conf. Proc. 2343, 020009 (2021) | 2021/3/1 | |
| 16 | Singular Spectrum Transformation for Detecting Molecular Motion Mode Change of Protein Systems | Takefumi Yamashita, Naoyuki Shoji | AIP Conf. Proc. 2343, 020010 (2021) | 2021/3/1 | |
| 17 | Structural and dynamical insights into the PH domain of p62 in human TFIIH | Masahiko Okuda, Toru Ekimoto, Jun-ichi Kurita, Mitsunori Ikeguchi, Yoshifumi Nishimura | Nucleic Acids Research, Vol.49, 5, 2916-2930(2021) | 2021/3/1 | |

| 18 | Microsecond-timescale MD simulation of EGFR minor mutation predicts the structural flexibility of EGFR kinase core that reflects EGFR inhibitor sensitivity | Yoshizawa T, Uchibori K, Araki M, Matsumoto S, Ma B, Kanada R, Seto Y, Oh-hara T, Koike S, Ariyasu R, Kitazono S, Ninomiya H, Takeuchi K, Yanagitani N, Takagi S, Kishi K, Fujita N, Okuno Y, Nishio M, Katayama R | npj Precision Oncology volume 5, Article number: 32 (2021) | 2021年4月 |
|----|--|---|--|----------|
| 19 | Coarse-Grained Modeling of Multiple Pathways in Conformational Transitions of Multi-Domain Proteins | Ai Shinobu, Chigusa Kobayashi, Yasuhiro Matsunaga, Yuji Sugita | Journal of Chemical Information and Modeling, Vol.61, pp.2427-2443 (2021) | 2021年5月 |
| 20 | Exploring ligand binding pathways on proteins using hypersound-accelerated molecular dynamics | Araki M, Matsumoto S, Bekker G.J, Isaka Y, Sagae Y, Kamiya N, Okuno Y | Nature Communications, Vol.12, 2793 (2021) | 2021年5月 |
| 21 | Moving toward generalizable NZ-1 labeling for 3D structure determination with optimized epitope-tag insertion | Risako Tamura-Sakaguchi, Rie Aruga, Mika Hirose, Toru Ekimoto, Takuya Miyake, Yohei Hizukuri, Rika Oi, Mika K. Kaneko, Yukinari Kato, Yoshinori Akiyama, Mitsunori Ikeguchi, Kenji Iwasaki, Terukazu Nogi | Acta Crystallographica Section D: Structural Bi | 2021年5月 |
| 22 | Efficient Search for Energetically Favorable Molecular Conformations against Metastable States via Gray-Box Optimization | Kei Terayama, Masato Sumita, Michio Katouda, Koji Tsuda, Yasushi Okuno | Journal of Chemical Theory and Computation (2021) | 2021年7月 |
| 23 | Optimized Hydrogen Mass Repartitioning Scheme Combined with Accurate Temperature/Pressure Evaluations for Thermodynamic and Kinetic Properties of Biological Systems | Jaewoon Jung, Kento Kasahara, Chigusa Kobayashi Hiraku Oshima, Takaharu Mori, Yuji Sugita | Journal of Chemical Theory and Computation, Vol.17, pp.5312-5321 (2021) | 2021年7月 |
| 24 | Structure-Based de Novo Molecular Generator Combined with Artificial Intelligence and Docking Simulations | Biao Ma, Kei Terayama, Shigeyuki Matsumoto, Yuta Isaka, Yoko Sasakura, Hiroaki Iwata, Mitsugu Araki, Yasushi Okuno | Journal of Chemical Information and Modeling, Vol.61, pp.3304-3313 (2021) | 2021年7月 |
| 25 | PaCS-MD/MSM: Parallel Cascade Selection Molecular Dynamic Simulation in Combination with Markov State Model as an Efficient non-Bias Sampling Method | Duy Phuoc Tran, Hiroaki Hata, Takumi Ogawa, Yuta Taira, Akio Kitao | 分子シミュレーション学会誌アンサンブ ル, 22, 151-156 (2020). | 2020年4月 |
| 26 | X線小角散乱と分子動力学シミュレーションを組み合わせた生体分子の溶液構造解析 | 浴本亨, 小甲裕一, 笠口友隆, 池口満徳 | アンサンブル (分子シミュレーション学会 誌), 22巻, 3, 239-251 | 2020年7月 |
| 27 | 『プレシジョン・メディシンを加速する「創薬ビッグ データ統合システム」の推進』、「富岳」が拓く計算科 学の未来 | 荒木望嗣,鎌田真由美,奥野恭史 | milsil 13(6), 2020 | 2020年11月 |

| 28 | 分子動力学ソフトウェアGENESISを用いたタンパク質-リガンド結合の自由エネルギー計算 | 尾嶋 拓, 李 秀栄, 新津 藍, 杉田 有治 | シミュレーション (日本シミュレーション 学会), Vol.40, pp.22-28 (2021) | 2021年3月 |
|----|--|--|--|---------|
| 29 | Efficient Search for Energetically Favorable Molecular Conformations against Metastable States via Gray-Box Optimization | Kei Terayama, Masato Sumita, Michio Katouda, Koji Tsuda, Yasushi Okuno | Journal of Chemical Theory and Computation (2021) | 2021年7月 |
| 30 | Structure-Based de Novo Molecular Generator Combined with Artificial Intelligence and Docking Simulations | Biao Ma, Kei Terayama, Shigeyuki Matsumoto, Yuta Isaka, Yoko Sasakura, Hiroaki Iwata, Mitsugu Araki, Yasushi Okuno | Journal of Chemical Information and Modeling, Vol.61, pp.3304-3313 (2021) | 2021年7月 |

■ 研究会

| No. | 発表した成果(発表題目) | 発表者氏名 | 発表した場所(研究会名等) | 発表した時期 | 分類 | 開催地 |
|-----|---|-------------|---|----------|------|-------------------|
| 1 | AI・シミュレーションによる薬効・毒性予測 | 奥野恭史 | 第47回日本毒性学会学術年会シンポジウム | 2020年6月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 2 | 「シミュレーション・AI駆動型創薬」 | 奥野恭史 | 俯瞰ワークショップ ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会 | 2020年7月 | 招待講演 | オンライン |
| 3 | シミュレーション・AI駆動型創薬 | 奥野恭史 | 俯瞰ワークショップ ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会 | 2020年7月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 4 | 創薬AIとこれからの医薬品開発、新たな産業の役割 | 奥野恭史 | IQVIAセミナー (製薬企業向け) | 2020年7月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 5 | 創薬AIとこれからの医薬品開発、新たな産業の役割 | 奥野恭史 | IQVIAセミナー (メディア向け) | 2020年7月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 6 | スーパーコンピュータ・AIが拓く創薬・医療の未来 | 奥野恭史奥野恭史 | 人事労災対策委員会・総務委員会 | 2020年9月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| | All-atom molecular dynamics simulations of spike protein on the surface of SARS-CoV-2 in solution | Yuji Sugita | RIKEN-NRC HPC Workshop | 2020年10月 | 口頭発表 | Japan (Online) |
| 8 | スーパーコンピュータ・AIが拓くがん分子標的治療戦略 | 奥野恭史 | 第24回日本がん分子標的治療学会学術集会 | 2020年10月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 9 | 新型コロナウイルス 表面のタンパク質動的構造予測 | 杉田有治 | 第9回JCAHPCセミナー | 2020年10月 | 招待講演 | 東京、日本 (オ ンライン) |
| 10 | 深層学習技術による cryo-EM密度マップデータに隠された動的情報の抽出 | 松本篤幸 | 第一回クライオ電子顕微鏡画像からの高度 情報処理研究会 | 2020年10月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 11 | AI・シミュレーションが拓く創薬・医療の未来 | 奥野恭史 | CHUGAI DIGITAL DAY~ヘルスケア×デジタルの2030未来予想図 | 2020年11月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 12 | 創薬におけるAIの現状と未来 | 奥野恭史 | 第21回日本毒性病理学会 | 2020年11月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |

| 13 | 計算機シミュレーションで細胞の中を観る | 杉田有治 | 京都大学MACSコロキアム | 2020年11月 | 招待講演 | 京都、日本 (オンライン) |
|----|---|-------------|---------------------------------------|----------|------|---------------|
| 14 | AI・シミュレーションが拓く創薬・医療の未来 | 奥野 恭史 | けいはんな R&D イノベーションフォーラム | 2020年12月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| | 「富岳」がもたらす創薬・医療へのインパクト | 奥野恭史 | 第13回 スーパーコンピューティング技術 産 業応用シンポジウム | 2020年12月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 16 | スーパーコンピュータが明らかにする蛋白質の動的構造と機 能 | 杉田有治 | 理研・東北大学連携シンポジウム「計測科 学が拓く生命科学の新展開」 | 2020年12月 | 招待講演 | 日本 |
| 17 | スーパーコンピュータ・AIが拓く創薬の未来 | 奥野恭史 | 第3回産学官連携情報交流セミナー | 2020年12月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 18 | スーパーコンピュータ・AIが拓く創薬の未来 | 奥野恭史 | Life Science Startup Ecosystem | 2020年12月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 19 | AIが拓く創薬イノベーション | 奥野 恭史 | 第16回がんトランスレーショナルリサーチ (TR) ワークショップ | 2021年1月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 20 | Replica-exchange simulations on the conformational dynamics of spike protein on the surface of SARS-CoV-2 | Yuji Sugita | Molecular Basis of Proteinopathies | 2021年2月 | 招待講演 | Online, USA |
| 21 | データ駆動型 医療・医薬品・ヘルスケア産業 | 奥野 恭史 | IQVIAセミナー | 2021年2月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 22 | 医薬プロセス最適化プラットフォーム開発の現状と今後 | 奥野 恭史 | 理化学研究所 医科学イノベーションハブ 推進プログラム シンポジウム | 2021年3月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |
| 23 | 富岳を用いた新型コロナウイルス表面のスパイクタンパク質 動的構造予測 | 杉田有治 | 近畿化学協会コンピュータ化学部会 | 2021年3月 | 招待講演 | オンライン、日 本 |
| 24 | 産学連携コンソーシアムLINCから観たAI創薬の現状と未来 | 奥野 恭史 | 知的財産戦略ネットワーク講演会 | 2021年3月 | 招待講演 | オンライン・日 本 |

■ 一般向講演 会・セミナー等

| No. | 発表した成果(発表題目) | 発表者氏名 | 発表した場所(研究会名等) | 発表した時期 | 開催地 |
|-----|--------------------------|-------|--|----------|-------|
| 1 | 創薬AIとこれからの医薬品開発、新たな産業の役割 | 奥野恭史 | IQVIAセミナー (メディア向け) | 2020年7月 | オンライン |
| 2 | 創薬AIとこれからの医薬品開発、新たな産業の役割 | 奥野恭史 | IQVIAセミナー (製薬企業向け) | 2020年7月 | オンライン |
| 3 | スーパーコンピュータ・AIが拓く創薬・医療の未来 | 奥野恭史 | 人事労災対策委員会・総務委員会 | 2020年9月 | オンライン |
| 4 | AI・シミュレーションが拓く創薬・医療の未来 | 奥野恭史 | CHUGAI DIGITAL DAY~ヘルスケア×デジタルの2030未来予想図 | 2020年11月 | オンライン |
| 5 | 「スーパーコンピュータ・AIが拓く創薬の未来」 | 奥野恭史 | 第3回産学官連携情報交流セミナー | 2020年12月 | オンライン |
| 6 | AIが拓く創薬イノベーション | 奥野恭史 | 第16回がんトランスレーショナルリサーチ (TR) ワークショップ AIが創る医薬品開 発のカッティング・エッジ | 2021年1月 | オンライン |
| 7 | データ駆動型 医療・医薬品・ヘルスケア産業 | 奥野恭史 | IQVIAセミナー | 2021年2月 | オンライン |

■ 新聞·TV·Web配信·雑誌·広報誌等

| lo. | 発表した成果(発表題目) | 発表者氏名 | 発表した場所(研究会名等) | 発表した時期 | 分類 |
|-----|--|---------------|---------------|---------|----|
| 1 | How Japan Is Using The World's Most Powerful Supercomputer To Accelerate Personalized Medicine | Mayumi Kamada | Forbes | 2021年2月 | 雑誌 |