

構造生物情報学の潮流と創薬

Trends in Structural Bioinformatics and Drug Discovery

本シンポジウムでは、AI 技術と生物情報学の革新、特に AlphaFold によるタンパク質構造予測の進展に焦点を当てます。タンパク質の三次元構造と機能、相互作用メカニズム、バイオインフォマティクスの進歩を共有し、構造予測の新手法や進化との関係、AI と構造生物学を融合した創薬プロセスや解析技術を探り、AI の限界と未来の可能性について議論します。また、研究者間の技術共有や新たなコラボレーションの促進を目指します。

This symposium focuses on AI-driven innovations in bioinformatics, particularly AlphaFold's advancements in protein structure prediction. Topics include 3D structure-function relationships, interaction mechanisms, new prediction methods, and AI-integrated drug discovery. Discussions will explore AI's limitations, future potential, and foster collaboration among researchers to advance computational biology and biomedical applications.

オーガナイザー：井上 豪（大阪大学）、広川 貴次（筑波大学）、由良 敬（早稲田大学）

Organizers : Tsuyoshi Inoue (UOsaka), Takatsugu Hirokawa (Univ. of Tsukuba), Kei Yura (Waseda Univ.)

[9:15] はじめに

Opening Remarks

○井上 豪 (Tsuyoshi Inoue)

大阪大学 (UOsaka)

S-1

[9:20] 免疫アルパカ由来大規模 VHH データセットを活用した AI 創薬への挑戦

Harnessing Large-Scale VHH Datasets from Immunized Alpacas for AI-Powered Therapeutic Development

○永田 崇^{1,2,3,4} (Takashi Nagata)、山崎 寛章^{4,5} (Hiroyuki Yamazaki)、前田 良太^{4,5} (Ryota Maeda)、
鶴田 博文⁴ (Hirofumi Tsuruta)、田村 龍太郎⁴ (Ryotaro Tamura)、伊村 明浩^{4,5} (Akihiro Imura)

¹ 京大・エネ研 (Inst. Adv. Energy, Kyoto Univ.)、² 京大・エネ科 (Grad. Sch. Energy Sci., Kyoto Univ.)、

³ 京大・エネ研・ICaNS (ICaNS, Inst. Adv. Energy, Kyoto Univ.)、⁴ COGNANO, Inc.、⁵ Biorhodes, Inc.

S-2

[9:49] 続・AlphaFold と分子シミュレーションの力学

On the dynamics of AlphaFold and molecular simulations, continued

○櫻庭 俊^{1,2} (Shun Sakuraba)

¹ QST・量子生命 (iQLS, QST)、² 千葉大・融合理工 (Grad. Sch. Sci. Eng., Chiba Univ.)

S-3

[10:18] AlphaFold は創薬の役に立つのか？

Is AlphaFold Useful for Drug Discovery?

○大上 雅史 (Masahito Ohue)

東科大・情 (Dept CS, Science Tokyo)

S-4

[10:47] 予測構造を利用した新規酵素反応機構の解析

Analysis of novel enzymatic reaction mechanisms using predicted structures

○森脇 由隆 (Yoshitaka Moriwaki)

東科大・総研・難研 (Med. Res. Lab., Ins. Integr. Res., Science Tokyo)

S-5

[11:16] 人と AI の融合によるデータ駆動型創薬

Data-driven drug discovery through collaboration between humans and AI

○池田 和由 (Kazuyoshi Ikeda)

理研・R-CCS (RIKEN R-CCS)