

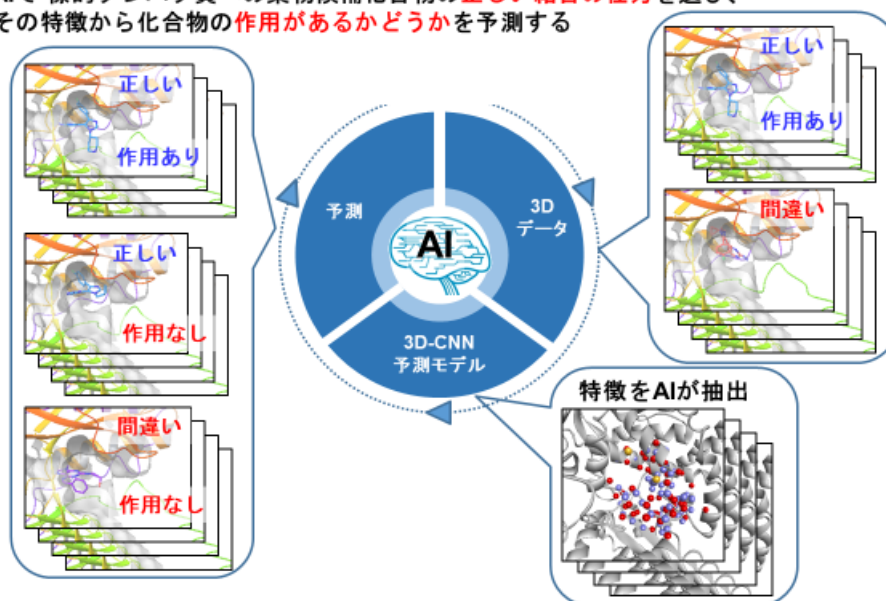
### ③ AIによるドッキング計算高度化 (LINC内番号: PJ12)

#### AIシステムの概要

ドッキング計算とは、主に小分子をタンパク質構造に結合させ、結合様式や結合力を推定するシミュレーション技術である。本プロジェクトでは機械学習法により標的タンパク質の3次元的な構造や特徴を捉える。薬物候補分子のドッキング計算を通じて結合様式の正誤予測、仮想スクリーニングの高精度化を目的とした機械学習モデルを開発する。

#### PJ12: AIによるドッキング計算高度化

AIで標的タンパク質への薬物候補化合物の正しい結合の仕方を選び、その特徴から化合物の作用があるかどうかを予測する



#### AIシステムの社会応用可能性

薬剤候補分子の結合様式の予測、研究開発初期における薬剤候補分子の探索が効率よく実施でき、新薬開発の成功確率向上につながることを期待される。

#### 参画メンバー (企業、アカデミア)

第一三共グループ、田辺三菱製薬(株)、小野薬品工業(株)、協和キリン(株)、日本新薬(株)、塩野義製薬(株)、三井化学アグロ(株)ほか数社

みずほ情報総研(株)

横浜市立大、京都大学大学院 医学研究科、(公財)神戸医療産業都市推進機構、理化学研究所