

重点課題1:「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」

代表者氏名:奥野恭史

サブ課題A:ポスト京でのMD高度化とアルゴリズム深化

サブ課題代表者:杉田 有治

1. 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	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)	招待講演(○を記)
1	Nontargeted Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics for Enhancing the Conformational Sampling of Proteins	Ryuhei Harada(University of Tsukuba), Akio Kitao(The University of Tokyo)	J. Chem. Theor. Comput., 11, 5493-5502	2015年11月	英語		
2	Dynamic Coupling among Protein Binding, Sliding, and DNA Bending Revealed by Molecular Dynamics	Cheng Tan(Kyoto University), Tsuyoshi Terakawa(Columbia University), Shoji	Journal of the American Chemical Society, Vol.138 (27), pp.8512-8522	2016年6月	英語		
3	Histone acetylation dependent energy landscapes in tri-nucleosome revealed by residue-resolved molecular simulations	Le Chang(kyoto University), Shoji Takada(kyoto	Scientific Reports, 6: 34441 (13 pages) , doi: 10.1038/srep34441	2016年10月	英語		
4	Thermodynamics of Macromolecular Association in Heterogeneous Crowding Environments: Theoretical and Simulation Studies with a Simplified Model	Tadashi Ando(RIKEN, Japan; RIKEN Quantitative Biology Center, Japan.), Isseki Yu(RIKEN, Japan), Michael Feig(Michigan State University, United States), Yuji Sugita(RIKEN, Japan; RIKEN Quantitative Biology Center, Japan; RIKEN Advanced Institute for Computational Science	J. Phys. Chem. B, 120(46), 11856-11865 (2016)	2016年10月	英語		

5	Biomolecular interactions modulate macromolecular structure and dynamics in atomistic model of a bacterial cytoplasm	Isseki Yu(iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Takaharu Mori(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Tadashi Ando(Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center), Ryuhei Harada(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Jaewoon Jung(Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, Laboratory for Biomolecular Function Simulation, RIKEN Quantitative Biology Center, Computational Biophysics Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Michael Feig(Department of Biochemistry and Molecular	eLife, 2016;5:e19274	2016年11月	英語		
6	Communication: Constant uncertainty molecular dynamics: A simple and efficient algorithm to incorporate quantum nature into a real-time molecular dynamics simulation	Taisuke Hasegawa(Kyoto University)	J. Chem. Phys., 145, 171101 (2016)	2016年11月	英語		
7	Near-atomic structural model for bacterial DNA replication initiation complex and its functional insights	Masahiro Shimizu(Kyoto University), Yasunori Noguchi(Kyushu University), Yukari Sakiyama(Kyushu University), Hironori Kawakami(Kyushu University), Tsutomu Katayama(Kyushu University), Shoji	Proceedings of the National Academy of Sciences USA, vol.113, E8021—E8030, doi: 10.1073/pnas.1609649113	2016年11月	英語		
8	Influence of protein crowder size on hydration structure and dynamics in macromolecular crowding	Po-hung Wang(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Isseki Yu(iTHES Research Group, RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Yuji Sugita(Theoretical Molecular	Chemical Physics Letters 671 (2017) 63—70	2017年1月	英語		
9	Enhanced Conformational Sampling of N-Glycans in Solution with Replica State Exchange Metadynamics	Raimondas Galvelis, Suyong Re, and Yuji Sugita.	J. Chem. Theory Comput., 13, 1934–1942 (2017).	2017年4月	英語		
10	Neural Network and Nearest Neighbor Algorithms for Enhancing Sampling of Molecular Dynamics	Raimondas Galvelis(Theoretical Molecular Science, RIKEN), Yuji Sugita(Theoretical	Journal of Chemical Theory and Computation (in press) DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00188	2017年4月	英語		

11	Photoactivation Intermediates of a G-Protein Coupled Receptor Rhodopsin Investigated by a Hybrid Molecular Simulation	Motoshi Kamiya(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	Journal of Physical Chemistry B, 121, 3842–3852 (2017)	2017年4月	英語		
12	The structural basis of a high affinity ATP binding epsilon subunit from a bacterial ATP synthase	Alexander Krah(Korea Institute for Advanced Study), Yasuyuki Kato-Yamada(Rikkyo University), Shoji Takada(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University), Yoshihiro Uchida(Kyoto University), Taisuke Hasegawa(Kyoto University), Masahiro Higashi(University of the Ryukyus), Takahiro Kosugi(Institute for Molecular Science), Motoshi Kamiya(Kyoto University)	PLOS ONE, Vol.12, e0177907(2017)	2017年5月	英語		
13	QM/MM geometry optimization on extensive free-energy surfaces for examination of enzymatic reactions and design of novel functional properties of proteins	Fisham M. Dokainish(The University of Tokyo), Daichi Yamada(Nagoya Institute of Technology), Tatsuya Iwata(Nagoya Institute of Technology), Hideki Kandori(Nagoya Institute of Technology), Akio Kitao(The University of Tokyo)	Annu. Rev. Phys. Chem., 68, 135–154 (2017)	2017年5月	英語		
14	Electron Fate and Mutational Robustness in the Mechanism of (6-4)Photolyase-Mediated DNA Repair	Jaewoon Jung(RIKEN AICS, RIKEN), Yuji Sugita(RIKEN AICS, RIKEN, RIKEN QBiC, RIKEN iTHES)	ACS Catalysis, Vol.7 pp4835–4845 (2017)	2017年6月	英語		
15	Multiple program/multiple data molecular dynamics method with multiple time step integrator for large biological systems	Mami Saito(Kyoto University), Tsuyoshi Terakawa(Columbia University), Shoji Kazuhiro Takemura(The University of Tokyo), Kyoko Hanawa-Suetsugu(Nara Advanced Institute of Science and Technology), Shiro Suetsugu(Nara Advanced Institute of Science and Technology), Akio Kitao(The University of	Journal of Computational Chemistry, Vol. 38, pp. 1410–1418	2017年6月	英語		
16	How one-dimensional diffusion of transcription factors are affected by obstacles: coarse-grained molecular dynamics study	Koichi Tamura(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	Molecular Simulation, Vol.43, pp.1315–1321	2017年6月	英語		
17	Salt Bridge Formation between the I-BAR Domain and Lipids Increases Lipid Density and Membrane Curvature	林重彦(京都大学)	Scientific Reports 7, Article number: 6808	2017年7月	英語		
18	Atomistic modeling of alternating access of a mitochondrial ADP/ATP membrane transporter with molecular simulations	医学のあゆみ - 第5土曜特集号「生命現象を観る - 革新的な構造生命科学が観せてくれる世界」, 262, 552–558	PLOS ONE, 12, e0181489 (2017)	2017年7月	英語		
19	ハイブリッド分子シミュレーションによるロドプシン光受容体の分子機能の理解と設計			2017年7月	日本語		

20	A polyaromatic nanocapsule as a sucrose receptor in water	Masahiro Yamashina(Tokyo Institute of Technology), Munetaka Akita(Tokyo Institute of Technology), Taisuke Hasegawa(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University), Michito Yoshizawa(Tokyo Institute of Technology)	Science Advances, 3, e1701126	2017年8月	英語		
21	Crowding in Cellular Environments at an Atomistic Level from Co	Michael Feig, Grzegorz Nawrocki(Department of Biochemistry and Molecular Biology, Michigan State University), Isseki Yu(iTHES Research Group, RIKEN, and Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Po-hung Wang(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN), Yuji Sugita(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN, Advanced Institute for Computational Science, RIKEN, Quantitative Biology Center, RIKEN, and iTHES Research Group, RIKEN)	Journal of Physical Chemistry B, vol.121, 8009-8025, 2017	2017年8月	英語		
22	Allosteric conformational change cascade in cytoplasmic dynein revealed by structurebased molecular simulations	Shintaroh Kubo(Kyoto University), Wenfei Li(Nanjing University), Shoji Takada(Kyoto University)	PLOS Computational Biology, Vol.13, e1005748(2017)	2017年9月	英語		
23	Molecular dynamics simulation of bacterial flagella	Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology), Hiroaki Hata(The University of	Biophysical Reviews, pp.1-13 (2017)	2017年11月	英語		

24	Slow-Down in Diffusion in Crowded Protein Solutions Correlates with Transient Cluster Formation	Grzegorz Nawrocki (1), Po-hung Wang (2), Isseki Yu (2,3), Yuji Sugita (2,3,4,5), Michael Feig (1) (1) Department of Biochemistry and Molecular Biology, Michigan State University, East Lansing, Michigan 48824, United States (2) RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory, 2-1 Hirosawa, Wako-shi, Saitama 351-0198, Japan (3) RIKEN iTHES, 2-1 Hirosawa, Wako-shi, Saitama 351-0198, Japan (4) RIKEN Quantitative Biology Center, Integrated Innovation Building 7F, 6-7-1 Minaotojima-Minamimachi, Chuo-ku, Kobe, Hyogo 650-0047, Japan (5) RIKEN Advanced Institute for Computational	Journal of Physical Chemistry B 2017, 121, 11072-11084	2017年11月	英語		
25	Sequence-dependent nucleosome sliding in rotation-coupled and uncoupled modes revealed by molecular simulations	Toru Niina(Kyoto University), Giovanni B. Brandani(Kyoto University), Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	PLOS Computational Biology, Vol.13, pp.e100	2017年12月	英語		
26	Protein-Ligand Dissociation Simulated by Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics	Duy Phuoc Tran(The University of Tokyo), Kazuhiro Takemura(The University of Tokyo), Kazuo Kuwata(Gifu University), Akio Kitao(Tokyo Institute	Journal of Chemical Theory and Computation, 14, 404-417 (2018)	2018年1月	英語		
27	Characterization of Conformational Ensembles of Protonated N-glycans in the Gas-Phase	Suyong Re(RIKEN), Shigehisa Watabe(RIKEN), Wataru Nishima(RIKEN), Eiro Muneyuki(Chuo Univ.), Yoshiki Yamaguchi(RIKEN), Alexander D. MacKerell Jr.(Univ. Maryland), Yuji	Scientific Reports, 8, 1644 (2018).	2018年1月	英語		
28	DNA sliding in nucleosomes via twist defect propagation revealed by molecular simulations	Giovanni B Brandani(Kyoto University), Toru Niina(Kyoto University), Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	Nucleic Acids Research, Vol.46, pp.2788-2801 (2018)	2018年2月	英語		
29	Binding free energy analysis of protein-protein docking model structures by eVERdock	Kazuhiro Takemura(The University of Tokyo), Nobuyuki Matubayasi(Osaka University), Akio Kitao(The University of Tokyo, Tokyo Institute of Technology)	The Journal of Chemical Physics Vol.148, 105101	2018年3月	英語		

30	Reconstruction of Atomistic Structures from Coarse-Grained Models for Protein-DNA Complexes	Masahiro Shimizu(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto University)	Journal of Chemical Theory and Computation, Vol.14, pp.1682-1694 (2018)	2018年3月	英語		
31	Kinetic energy definition in velocity Verlet integration for accurate pressure evaluation	Jung, Jaewoon; Sugita, Yuji(RIKEN Cluster Pioneering Res, Theoret Mol Sci Lab, 2-1 Hirosawa, Wako, Saitama 3510198, Japan), Jung, Jaewoon; Kobayashi, Chigusa; Sugita, Yuji(RIKEN Ctr Computat Sci, Computat Biophys Res Team, Chuo Ku, 7-1-26 Minatojima Minamimachi, Kobe, Hyogo 6400047, Japan), Sugita, Yuji(RIKEN Ctr Biosyst Dynam Res, Lab Biomol Funct Simulat, Chuo Ku, 6-7-1 Minatojima Minamimachi, Kobe, Hyogo	JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, Vol.148(2018)	2018年4月	英語		
32	Dynamic and Structural Modeling of the Specificity in Protein-DNA Interactions Guided by Binding Assay and Structure Data	Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	Journal of Chemical Theory and Computation, Vol.14, pp.3877-3889 (2018)	2018年5月	英語		
33	Interactions of HP1 Bound to H3K9me3 Dinucleosome by Molecular Simulations and Biochemical Assays	Shuhei Watanabe(Kyoto University), Yuichi Mishima(Osaka University), Masahiro Shimizu(Kyoto University), Isao Suetake(Osaka University), Shoji Takada(Kyoto	Biophysical Journal, Vol.114, pp.2336-2351(2018)	2018年5月	英語		
34	ColDock: Concentrated Ligand Docking with All-Atom Molecular Dynamics Simulation	Kazuhiro Takemura(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2 Chome-12-1, Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Chika Sato(The University of Tokyo), Akio Kitao(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2 Chome-12-1, Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan)	The Journal of Physical Chemistry B, 122(29), pp.7191-7200 (2018)	2018年7月	英語		
35	Similarities and Differences between Thymine(6-4)Thymine/Cytosine DNA Lesion Repairs by Photolyases	Hisham M. Dokainish(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, M6-13, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Akio Kitao(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, M6-13, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo	The Journal of Physical Chemistry B, Vol.122(36), pp.8537-8547 (2018)	2018年8月	英語		

36	An Atomistic Model of a Precursor State of Light-Induced Channel Opening of Channelrhodopsin	Cheng Cheng(Kyoto University), Motoshi Kamiya(Kyoto University), Mizuki Takemoto(The University of Tokyo), Ryuichiro Ishitani(The University of Tokyo), Osamu Nureki(The University of Tokyo), Norio Yoshida(Kyushu University), Shirohiko Hayashi(Kyoto University), Hiraku Oshima(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Suyong Re(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Masayoshi Sakakura(Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University), Hideo Takahashi(Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University), Yuji Sugita(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Ai Shimobu(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Kazuhiro Takemura(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Nobuyuki Matubayasi(Division of Chemical Engineering, Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan), Akio Kitao(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan)	Biophysical Journal, 115, 1281-1291(2018)	2018年10月	英語		
37	Population Shift Mechanism for Partial Agonism of AMPA Receptor	Hiraku Oshima(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Suyong Re(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Masayoshi Sakakura(Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University), Hideo Takahashi(Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University), Yuji Sugita(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Ai Shimobu(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Kazuhiro Takemura(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Nobuyuki Matubayasi(Division of Chemical Engineering, Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan), Akio Kitao(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan)	Biophysical Journal 116, 57-68, 2018	2018年11月	英語		
38	Refining evERdock: Improved selection of good protein-protein complex models achieved by MD optimization and use of multiple conformations	Ai Shimobu(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Kazuhiro Takemura(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan), Nobuyuki Matubayasi(Division of Chemical Engineering, Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan), Akio Kitao(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan)	The Journal of Chemical Physics, Vol.149, pp.195101 (2018)	2018年11月	英語		
39	Chromatin remodelers couple inchworm motion with twist-defect formation to slide nucleosomal DNA	Giovanni B Brandan(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto University)	PLoS Comput Biol 14(11):e1006512.	2018年11月	英語		
40	Multi-strand beta-sheet of Alzheimer Aβ(1-40) folds to beta-strip helix: Implication for protofilament formation	Steven Hayward(University of East Anglia), Akio Kitao(School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology)	Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, pp.1-11 (2018)	2018年12月	英語		

41	Dissociation Process of a MDM2/p53 Complex Investigated by Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics and the Markov State Model	Duy Phuoc Tran(School of Life Sciences and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1, Ookayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8550, Japan), Akio Kitao(School of Life Sciences and Technology, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1	The Journal of Physical Chemistry B, Vol.123, pp.2469-2478 (2019)	2019年1月	英語		
----	---	---	---	---------	----	--	--

2. 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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	A MOLECULAR DYNAMICS CALCULATION STUDY OF POLIOVIRUS AND POLIOVIRUS RECEPTOR CD155	Yuta Endo, Keisuke Mizutani, Noriyuki Yoshii, Atsushi Yamada, Yoshimichi Andoh, Kazushi Fujimoto, Hidekazu Kojima, Wataru Shinoda(Nagoya University), Atsushi Nakagawa(Osaka University), Akio Nomoto(Institute of Microbial Chemistry)	The 2015 Conference on Foundations of Molecular Modeling and Simulation (FOMMS2015)	2015年7月	ポスター発表	
2	Structure, dynamics, and function of bacterial flagella investigated by molecular dynamics simulation	Akio Kitao(The University of Tokyo)	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015	2015年12月	招待講演	
3	Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics for Efficient Conformational Sampling and Free Energy Calculation of	Akio Kitao(The University of Tokyo)	ICCMSE2016, Computational Chemistry (CC) Symposium	2016年3月	招待講演	
4	Crucial Role of Protein Flexibility in Enzymatic Catalysis	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	IAS Focused Program on "Molecular Machines of Life: Simulations Meets	2016年5月	口頭発表	
5	Multiscale Modeling of Molecular Motors and Dynamic Protein-Nucleic Acid Complexes	Shoji Takada(Kyoto University)	Molecular Machines of Life: Simulation Meets Experiment	2016年5月	招待講演	
6	Enhanced Conformational Sampling Methods for Conformational Dynamics of Proteins, Membranes, and N-glycans	Yuji Sugita(RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN iTHES, RIKEN AICS, RIKEN	International Workshop on Frontiers in Molecular Biophysics at Shanghai	2016年7月	招待講演	
7	Crucial Role of Protein Flexibility in Enzymatic Catalysis	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	The 16th KIAS Conference on Protein Structure and Function	2016年9月	招待講演	
8	Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics for Efficient Conformational Sampling of Biomolecular Systems	Akio Kitao(The University of Tokyo)	The 4th International Conference on Molecular Simulation	2016年10月	招待講演	
9	Crucial Role of Protein Flexibility in Enzymatic Catalysis	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016年10月	招待講演	
10	Multiscale modeling of flexible biomolecular complexes	Shoji Takada(Kyoto University)	The 4th International Conference on Molecular Simulation	2016年10月	招待講演	
11	Simulating biomolecular interactions and functions	Akio Kitao(The University of Tokyo)	International Symposium on Research and Education of Computational Science	2016年11月	招待講演	
12	Pressure Effects on Dissociation of CheY-FlIM Complex Studied by Molecular Dynamics Simulations	Hiroaki Hata(The University of Tokyo), Yasutaka Nishihara(The University of Tokyo), Masayoshi Nishiyama(Kyoto University), Ikuro Kawagishi(Hosei University), Akio Kitao(The University of Tokyo)	Biophysical Society 61st Annual Meeting	2017年2月	ポスター発表	

13	Protein-Protein complex structure prediction using the solution theory in the energy representation	Kazuhiro Takemura(Univ. Tokyo), Nobuyuki Matubayasi(Osaka Univ.), Akio Kitao(Univ. Tokyo)	Biophysical Society 61st Annual Meeting	2017年2月	ポスター発表	
14	Dissociation Simulation of CheY-FliM Complex by Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics	Hiroaki Hata(Univ. Tokyo)	Bacterial Flagella, Injectisome and Type III Secretion System	2017年3月	ポスター発表	
15	DNA sliding on nucleosomes via twist defects revealed by molecular dynamics simulations	Giovanni Brandani(Kyoto University), Toru Niina(Kyoto University), Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	The 5th International Symposium of the Mathematics on Chromatin Dynamics	2017年3月	ポスター発表	
16	Dissociation Simulation of CheY-FliM Complex by Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics	Hiroaki Hata(The University of Tokyo), Yasutaka Nishihara(The University of Tokyo), Masayoshi Nishiyama(Kyoto University), Ikuro Kawagishi(Hosei University), Akio Kitao(The University of Tokyo)	Bacterial Flagella, Injectisomes & Type III Secretion Systems	2017年3月	ポスター発表	
17	Dynamic structure of bacterial flagellar proteins observed in silico	Akio Kitao(The University of Tokyo)	Bacterial Flagella, Injectisomes & Type III Secretion Systems	2017年3月	口頭発表	
18	Nucleosome Repositioning Investigated by Coarse-Grained MD Simulations	Giovanni Brandani(Kyoto University)	CECAM workshop "Multiscale Modeling and Experimental Approaches to Genome Organization"	2017年4月	口頭発表	
19	Understanding and designing color variants of retinal binding proteins by molecular simulations	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	253rd American Chemical Society National Meeting	2017年4月	招待講演	
20	Molecular Dynamics Analysis of Membrane Protein Structure and Dynamics	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS, QBiC, iTHES)	Telluride Summer Conference on Macromolecular Crowding	2017年6月	招待講演	
21	Machine Learning Approach for Protein Dynamics by combining smFRET and MD simulations	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS)	Telluride Summer Conference on Free Energy Calculations: Three decades of adventure in chemistry and biophysics	2017年7月	招待講演	
22	Refining binding free energies of docked complexes by sampling configurations during molecular dynamics simulations	Ai Shinobu(Univ. Tokyo)	Conformational Ensembles from Experimental Data and Computer	2017年8月	ポスター発表	
23	Molecular Dynamics Simulations of Conformational Changes in SR Ca ²⁺ -ATPase	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS)	15th International Conference on "Na,K-ATPase and Related Transport ATPases"	2017年9月	招待講演	
24	Allosteric conformational change pathway of Cytoplasmic dynein revealed by coarse-grained molecular simulation	Shintaroh Kubo(Kyoto University), Wenfei Li(Nanjing University), Shoji Takada(Kyoto University)	International Workshop Dynein2017	2017年10月	ポスター発表	
25	Rapid Nitric Oxide Transport in the Nitrite Reductase:Nitric Oxide Reductase Complex	Yuji Sugita (RIKEN TMS)	The 1st Samsung Global Research Symposium on "Structure Dynamics, and Thermodynamics of Biomolecular	2017年11月	招待講演	
26	Quantum Chemical Geometry Optimization on Extensive Free Energy Surfaces of Proteins	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	Recent Advances in Modelling in Rare Events (RARE2017)	2017年12月	招待講演	
27	Machine Learning Approach to Connect Time-Series Data of Single-Molecular Experiments with Molecular Dynamics Simulations of Protein Folding Dynamics	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS)	Greater Boston Area Lecture Series (MIT)	2018年2月	招待講演	

28	Dynamics and Interactions of Proteins And Metabolites in Cellular Crowding Environments: All-atom Molecular dynamics study	Isseki Yu (1,2), Takaharu Mori (1), Tadashi Ando (3), Ryuhei Harada (4), Jaewoon Jung (4), Yuji Sugita (1,2,3,4), Michael Feig (5) (1) RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory (2) RIKEN iTHES (3) RIKEN Quantitative Biology Center (4) RIKEN Advanced Institute for Computational Science (5) Department of Biochemistry and Molecular	62nd Annual Meeting of Biophysical Society	2018年3月	口頭発表	
29	ColDock: Concentrated ligand Docking method for an efficient protein-ligand complex structure prediction using all atom MD	Kazuhiro Takemura(Tokyo Institute of Technology)	The 23rd Biophysics Conference	2018年5月	ポスター発表	
30	A Machine Learning Approach for Linking Simulations with Single-Molecule Experiments	Yuji Sugita (RIKEN)	TSRC Workshop on Coarse-Grained Modeling of Structure and Dynamics of Biomacromolecules V	2018年7月	招待講演	
31	Protein-Ligand Binding in Dilute Solution and Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN)	TSRC Workshop on "Protein and Peptide Interactions in Cellular Environments"	2018年7月	招待講演	
32	Modeling protein-DNA interaction for coarse-grained molecular dynamics	Shoji Takada(Kyoto University)	Coarse-Grained Modeling of Structure and Dynamics of Biomacromolecules	2018年7月	招待講演	
33	Conformational changes between E1P to E2P states of SERCA by MD simulations based on string method and free-energy calculations	Yuji Sugita (RIKEN) and Chigusa Kobayashi (RIKEN)	the 256th ACS National Meeting in Boston on "Membrane Protein Simulations & Free Energy Approaches"	2018年8月	招待講演	
34	Development of the flexible-fitting MD simulation method for cryo-EM images of large macromolecular structures and dynamics	Yuji Sugita (RIKEN) and Takaharu Mori (RIKEN)	the 256th ACS National Meeting in Boston on "SESSION: COMP Meets CRYO: New Frontiers in Flexible Fitting, Image Processing & Refinement of Cryo-EM Data"	2018年8月	招待講演	
35	Computational approach to investigate protein complex formation and dissociation	Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology)	Computational Biophysics at the Molecular and Meso scales	2018年10月	招待講演	
36	Protein-Drug Interaction in Dilute Solution and In Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN)	XIVth ICISE Workshop on Computational Biophysics at the Molecular and Meso	2018年10月	招待講演	
37	Chromatin and transcription factor dynamics via coarse-grained molecular simulations	Shoji Takada(Kyoto University)	14th Rencontres du Vietnam "Computational Biophysics at the Molecular and	2018年10月	招待講演	
38	Photoactivation Intermediate of AsLOV2 Photoreceptor Protein Investigated by a Hybrid Molecular Simulation	Masahiko Taguchi(Kyoto University), Cheng Cheng(Kyoto University), Chika Higashimura(Kyoto University), Chika Higashimura(Kyoto	FUKUI 2018 Satellite Symposium	2018年10月	ポスター発表	
39	Investigating protein complex formation and dissociation in silico	Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology)	WRHI International Workshop on Advanced Laser Spectroscopy for Soft Molecular	2018年11月	招待講演	
40	Mechanisms for Protein-Ligand Binding in Solution and In Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN)	The 18th KIAS Conference on "Protein Structure and Function"	2018年11月	招待講演	

41	Protein-ligand binding in crowded environments: Molecular dynamics simulation study	Kento Kasahara, Hiraku Oshima, Suyong Re, Yuji Sugita(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Yuji Sugita(RIKEN Center for Computational Science), Yuji Sugita(RIKEN Theoretical Molecular Science)	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	ポスター発表	
42	Towards integration of high-speed AFM data with biomolecular simulations	Shoji Takada(Kyoto University)	Workshop "Trends in Computational Molecular Biophysics"	2018年11月	招待講演	
43	Data-driven molecular simulations for integrative dynamic structural biology	Yuji Sugita (RIKEN) and Yasuhiro Matsunaga (RIKEN)	The 2nd workshop on Advances in Theory and Computation of Complex Systems - Biological Systems	2018年12月	招待講演	
44	Investigating dissociation and association mechanisms of protein complexes	Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology)	2nd workshop on Advances in Theory and Computation of Complex Systems --- Biological Systems	2018年12月	招待講演	
45	Optimization and Parallelization of GENESIS on GPU platforms	Yuji Sugita (RIKEN)	International Workshop on GPU accelerated Molecular Dynamics Simulations	2018年12月	招待講演	
46	Chromatin and transcription factor dynamics via coarse-grained molecular simulations	Shoji Takada(Kyoto University)	the 2nd workshop on "Advances in Theory and Computation of Complex Systems - Biological Systems"	2018年12月	招待講演	
47	Simulating dissociation and association processes of protein complexes	Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology)	TSRC workshop on Fluctuations and Dynamics in Biomolecular Function	2019年1月	招待講演	

3. 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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	粗視化分子モデリング:膜タンパクへの拡張	川本周平(名古屋大学工学研究科 化学・生物工学専攻), 篠田 渉(名古屋大学工学研究科 化学・生物工学専攻)	第29回分子シミュレーション討論会	2015年11月	口頭発表	
2	QM/MM RWFE-SCF法によるHen Egg White Lysozyme荷電性アミノ酸残基のpKa計算	長谷川太祐(京都大学), 林重彦(京都大学)	柔らかな分子系第5回全体合宿	2016年5月	ポスター発表	
3	アンキリンリピートドメインと脂質の相互作用によるTRPV1 チャネル活性の制御	2.竹村和浩, 末次志郎, 北尾彰朗(東京大学, 奈良先端科学技術大, 東京大学)	第16回日本蛋白質科学会年会	2016年6月	ポスター発表	
4	QM/MM RWFE-SCF法によるタンパク質荷電残基のpKa値の決定	長谷川太祐(京都大学), 林重彦(京都大学)	第10回分子科学討論会	2016年6月	口頭発表	
5	タンパク質との相互作用による脂質膜の構造変化ダイナミクス	北尾彰朗(東京大学)	第89回日本生化学大会	2016年9月	招待講演	
6	タンパク質と薬剤分子のQM/MM RWFE-SCF法による結合自由エネルギー計算の高精度化	長谷川太祐(京都大学), 林重彦(京都大学)	ポスト「K」重点課題1 ワークショップ	2016年9月	口頭発表	
7	柔らかなタンパク質の分子機能理解と設計	林 重彦(京都大学)	第10回分子科学討論会	2016年9月	招待講演	
8	Molecular dynamics study of pressure effects on unbinding of the CheY-FliM complex	Hiroaki Hata, Yasutaka Nishihara, Masayoshi Nishiyama, Ikuro Kawagishi, Akio Kitao(Univ. Tokyo, Univ. Tokyo, Kyoto Univ., Hosei Univ., Univ. Tokyo)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表	
9	Regulatory mechanism of TRPV1 channel activity by the interaction of ankyrin repeat domain with phospholipids	Kazuhiro Takemura(The University of Tokyo), Shiro Suetsugu(Nara Institute of Science and Technology), Akio Kitao(The University of	54th Annual Meeting of Biophysical Society of	2016年11月	招待講演	
10	Elucidating biophysical properties of the Minute Virus of Mice capsid: Coarse-Grained Molecular simulation	Koji Ono(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表	

11	Influence of Macromolecular Crowding on the Dynamics and Interactions of proteins: All-atom Molecular Dynamics Study	Isseki Yu(RIKEN ITIHES), Takaharu Mori(RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory), Tadashi Ando(RIKEN QBIC), Jaewoon Jung(RIKEN AICS), Ryhei Harada(RIKEN AICS), Michael Feig(Michigan State University), Yuji Sugita(RIKEN Theoretical Molecular Science)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表
12	Molecular dynamics of transcription factor-nucleosome interactions	Brandani Giovanni(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto University)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表
13	The movement of DNA binding protein including obstacles along DNA	Mami Saito(Kyoto University), Tsuyoshi Terakawa(Columbia University), Shoji	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表
14	pKa prediction of ionizable residues in proteins by QM/MM RWFE-SCF method combined with microsecond-long MD simulation	Taisuke Hasegawa(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	第54回生物物理学会	2016年11月	口頭発表
15	Theoretical Study of the Influence of Cellular Crowding on the Dynamics and Interactions of proteins	Isseki Yu(RIKEN ITIHES), RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory, Takaharu Mori(RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory), Tadashi Ando(RIKEN QBIC), Ryuhei Harada(RIKEN AICS), Jaewoon Jung(RIKEN AICS), Michael Feig(Michigan State University), Yuji Sugita(RIKEN Theoretical	第39回日本分子生物学会年会	2016年12月	招待講演
16	複雑生体分子系のマルチスケールシミュレーション	高田彰二(京都大学)	第14回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム	2017年1月	招待講演
17	柔らかな蛋白質ドメインと脂質との相互作用によるTRPチャネル活性の変化	竹村和浩(東京大学)	日本薬学会第137年会	2017年3月	招待講演
18	Target DNA sequence search mechanism of p53 studied by single-molecule experiments and molecular dynamics simulations	Akio Kitao(The University of Tokyo), Kiyoto Kamagata(Tohoku University), Satoshi Takahashi(Tohoku	日本化学会第97春季年会	2017年3月	招待講演
19	分子シミュレーションによる・細菌べん毛モーターの分子機構	北尾 彰朗(東京大学)	日本物理学会第72回年次大会	2017年3月	招待講演
20	AMPA受容体リガンド結合ドメインの変異による自由エネルギー地形の変化	尾崎 祐(理化学研究所 生命システム研究センター), 李秀榮(理化学研究所 生命システム研究センター), 坂倉正義(横浜市立大学 生命医科学研究科), 高橋 栄夫(横浜市立大学 生命医科学研究科), 杉田 有治(理化学研究所 生命システム研究セ	第17回蛋白質科学会年会	2017年6月	ポスター発表

21	Light-activation mechanism of LOV photoreceptor protein	Masahiko Taguchi(Kyoto University), Cheng Cheng(Kyoto University), Chika Higashimura(Kyoto University), Shigehiko Havashi(Kyoto University)	柔らかな分子系 第5回 公開シンポジウム	2017年6月	ポスター発表
22	Molecular Dynamics Analysis of Membrane Protein Structure and Dynamics	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	招待講演
23	Molecular dynamics simulations on biomolecular-structure-dynamics-function relationship in cellular environments	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS, QBiC, iTHES)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	招待講演
24	Near-atomic structural model for bacterial DNA replication initiation complex and its functional insights	Masahiro Shimizu(Kyoto University), Yasunori Noguchi(Kyushu University), Yukari Sakiyama(Kyushu University), Hironori Kawakami(Kyushu University), Tsutomu Katayama(Kyushu University), Shoji	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	口頭発表 & ポスター発表
25	Nucleosome dynamics studied by coarse-grained molecular	Shoji Takada(Kyoto	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	招待講演
26	分子動力学計算を用いた細胞質ダイニンの構造変化経路に関する構造解析	久保進太郎(京都大学), 高田彰二(京都大学)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	ポスター発表
27	イオンモビリティ質量分析における衝突断面積の物理化学的な決定因子	李秀栄(理化学研究所), 渡部茂久(理化学研究所), 二島涉(理化学研究所), 宗行英朗(中央大学理工学部), 山口芳樹(理化学研究所), 杉田有治(理化学研究所)	第36回日本糖質学会年会	2017年7月	口頭発表
28	HIV-1 proteaseの基質および反応阻害剤に関する分子シミュレーション	田口真彦(京都大学), 金曾将弘(京都大学), 林重彦(京	ポスト京 重点課題1 第3回ワークショップ	2017年8月	口頭発表
29	Protein-peptide dissociation at high pressure studied by parallel cascade selection molecular dynamics simulations	Hiroaki Hata(Univ. Tokyo), Yasutaka Nishihara(Univ. Tokyo), Masayoshi Nishiyama(Kyoto Univ.), Ikuro Kawagishi(Hosei Univ.), Akio Kitao(Tokyo Inst.	第55回日本生物物理学会	2017年9月	ポスター発表
30	Protein-protein complex structure prediction using the solution theory in the energy representation	Kazuhiro Takemura(Univ. Tokyo)	第55回日本生物物理学会	2017年9月	招待講演
31	Refining binding free energies of docked protein-protein complexes by sampling conformations during molecular dynamics simulations	Ai Shinobu(Univ. Tokyo), Kazuhiro Takemura(Univ. Tokyo), Akio Kitao(Tokyo Inst. Tech.)	第55回日本生物物理学会	2017年9月	ポスター発表
32	細胞混雑中の蛋白質と代謝物のダイナミクス: 全原子分子動力学法による研究	優乙石 (1,2), 森貴治 (1), 安藤格士 (3), 原田隆平 (4), Jung Jaewoon (4), 杉田有治 (1,2,3,4), Feig Michale (5) (1) 理研 理論分子科学研究室 (2) 理研 iTHES (3) 理研 QBiC (4) 理研 AICS (5) ミシガン州立大学 生化	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	口頭発表
33	A New Coarse-Grained Lipid Model for the Study of Lipid-Membrane Protein Systems	Diego Ugarte(Kyoto University), Shoji	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表
34	Atomistically deciphering functional processes of membrane transporter and receptor with molecular simulations	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	日本生物物理学会・シンポジウム “いろんな	2017年9月	招待講演

35	Dynamics of nucleosomes and transcription factors studied by molecular simulations	Shoji Takada(Kyoto University)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	招待講演	
36	Experimental and Computational Analysis of Protein-Protein Interaction in Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS, QBiC)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	招待講演	
37	HIV-1 proteaseの触媒的加水分解反応に関する理論科学的研究	金曾将弘(京都大学), 田口真彦(京都大学), 林重彦(京)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
38	Modeling Sequence-Specific Protein-DNA Interaction from High-Throughput Experiments	Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	口頭発表	
39	Nucleosome Repositioning Investigated by Coarse-Grained MD Simulations and Markov State Modeling	Giovanni Brandani(Kyoto University), Toru Niina(Kyoto University), Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	口頭発表	
40	Reverse mapping to reconstruct atomistic structures from coarse-grained models for DNA-protein complexes	Masahiro Shimizu(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto University)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	口頭発表	
41	Sequence Dependent Spontaneous Nucleosome Slidings Revealed by Molecular Dynamics Simulation	Toru Niina(Kyoto University), Giovanni Brandani(Kyoto University), Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
42	Theoretical study on light-activation mechanism of LOV photoreceptor protein	Masahiko Taguchi(Kyoto University), Cheng Cheng(Kyoto University), Chika Higashimura(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
43	Theoretical study on molecular mechanism of a light-driven ion transport of Halorhodopsin	Ryo Oyama(Kyoto University), Taisuke Hasegawa(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
44	Theoretical study on the anisotropy of Cytoplasmic dynein locomotion	Shintaoh Kubo(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto University)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
45	リガンド結合シミュレーションへのタンパク質構造揺らぎの取り込み	Suyong Re (RIKEN QBiC), Hiraku Oshima (RIKEN QBiC), Motoshi Kamiya (RIKEN AICS), Yuji Sugita (RIKEN QBiC, RIKEN AICS)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
46	光誘起チャネルロドプシンに関する理論研究	成せい(京都大学), 神谷基司(理化学研究所), 吉田紀生(九州大学), 林重彦(京都)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表	
47	柔らかいタンパク質の分子機能の理解と設計	林重彦(京都大学)	第66会高分子討論会シンポジウム「柔らか	2017年9月	招待講演	

48	Characteristics of Biomolecule Dynamics under the Crowding Environment of Cytoplasm Discovered by Massive All-atom simulation and Big-data analysis	Isseki Yu (1,2), Takaharu Mori (1), Tadashi Ando (3), Ryuhei Harada (4), Jaewoon Jung (4), Yuji Sugita (1,2,3,4), Michael Feig (5) (1) RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory (2) RIKEN iTHES (3) RIKEN Quantitative Biology Center (4) RIKEN Advanced Institute for Computational Science (5) Department of Biochemistry and Molecular	CBI学会2017年大会	2017年10月	口頭発表	
49	蛋白質構造変化を考慮したリガンド結合自由エネルギー計算法の開発	尾嶋 拓(理化学研究所 生命システム研究センター)	CBI学会2017年大会	2017年10月	招待講演	
50	Flexible Docking using Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulation	Suyong Re (RIKEN QBiC), Hiraku Oshima (RIKEN QBiC), Motoshi Kamiya (RIKEN AICS), Yuji Sugita (RIKEN QBiC, RIKEN AICS)	CBI学会2017年大会	2017年10月	口頭発表 & ポスター発表	
51	動的構造と生体環境を考慮した創薬応用シミュレーション	杉田有治(RIKEN TMS, AICS, QBiC)	CBI学会2017年大会	2017年10月	招待講演	
52	細胞質ダイニンの一方向輸送性能に関する分子シミュレーション研究	久保進太郎(京都大学), 高田彰二(京都大学)	第11回分子科学討論会	2017年10月	ポスター発表	
53	分子動力学を用いた細胞内分子動態の解析	杉田有治(RIKEN TMS, AICS, QBiC)	第45回構造活性相関シンポジウム	2017年11月	招待講演	
54	Effect of non-specific interactions on macromolecular structure and dynamics in cellular environments	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS, QBiC)	第40回日本分子生物学会年会(2017年度生)	2017年12月	招待講演	
55	AMPA受容体リガンド結合ドメインにおける隠れた安定状態と部分作動との関係	尾嶋 拓(理化学研究所 生命システム研究センター), 李秀榮(理化学研究所 生命システム研究センター), 坂倉正義(横浜市立大学 生命医科学研究科), 高橋 栄夫(横浜市立大学 生命医科学研究科), 杉田 有治(理化学研究所 生命システム研究セ	日本物理学会 第73回年次大会(2018年)	2018年3月	口頭発表	
56	カスケード型超並列シミュレーションでみるCheY-FliM 複合体解離 に対する圧力の影響	畑 宏明(東京大学), 北尾彰朗(東京工業大学)	第23回 べん毛研究交流会	2018年3月	口頭発表	
57	Na ⁺ 駆動型べん毛モーターPomA/PomB のThr 残基のイオン透過における役割: MD シミュレーション結果	1 尾上靖宏, 2 岩城雅代, 3 信夫愛, 3 西原泰孝, 1 岩月哲人, 1 寺島浩行, 4 北尾彰朗, 2 神取秀樹, 1 本間道夫(1名大, 2 名工大, 3 東大, 4 東工大)	第23回 べん毛研究交流会	2018年3月	口頭発表	
58	分子動力学シミュレーションによる生体分子機能モデリング	李 秀榮(理化学研究所 生命システム研究センター)	第1回近畿大学生物理工学部 HPC シンポ	2018年3月	招待講演	
59	PaCS-MDIによる タンパク質のダイナミクスと離合集散	北尾彰朗(東京工業大学生命理工学院)	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研	2018年4月	招待講演	
60	ColDock : 高濃度リガンド条件での全原子 MD シミュレーションを用いた蛋白質-リガンド複合体構造の効率的な探索手法	竹村和浩, 北尾彰朗(東京工業大学生命理工学院)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表	
61	Molecular simulations of protein dynamics in crowded	Yuji Sugita (RIKEN)	WS on "Protein Aggregation and anti-aggreg	2018年6月	招待講演	

62	AMPA受容体リガンド結合ドメインの隠れた安定状態	尾嶋 拓(理化学研究所 生命機能科学研究センター), 李秀栄(理化学研究所 生命機能科学研究センター), 坂倉正義(横浜市立大学 生命医科学研究科), 高橋 栄夫(横浜市立大学 生命医科学研究科), 杉田 有治(理化学研究所 生命機能科学研究センター)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
63	Refining binding free energies of docked protein-protein complexes by sampling conformations during molecular dynamics	信夫愛、竹村和浩、北尾彰朗(東京工業大学生命理工学)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
64	カスケード型超並列シミュレーションで見るタンパク質間結合の圧力依存性	畑宏明(東工大・生命理工学)、西原泰孝(東大・分生研)、西山雅祥(京大・白眉センター)、川岸郁朗(法政大・生命科学)、北尾彰朗(東工大・生命理工学)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
65	Coarse-Grained Force Field for Molecular Simulations of Lipid-Protein System	Diego Ugarte(Kyoto University), Shoji	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
66	ColDock: Concentrated ligand Docking method for an efficient protein-ligand complex structure prediction using all-atom MD	Kazuhiro Takemura, Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表
67	Differences and similarities in (6-4) Photolyase DNA repair pathways	Hisham Dokainish 1, Daichi Yamada 3, Hideki Kandori 3, Akio Kitao 2 (1 Theoretical Molecular Science Laboratory, Riken, 2 Tokyo Institute of Technology, 3 Nagoya Institute of Technology)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表
68	Free-energy landscapes reveal partial agonism at T686A mutation of AMPA receptor	Hiraku Oshima(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Suyong Re(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Masayoshi Sakakura(Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University), Hideo Takahashi(Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University), Yuji Sugita(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research)	The 56th Annual Meeting of The Biophysical Society	2018年9月	ポスター発表
69	Extensive molecular dynamics sampling characterizes ligand binding pathway to Src kinase	Suyong Re (RIKEN), Hiraku Oshima (RIKEN), Motoshi Kamiya (RIKEN) and Yuji Sugita (RIKEN)	第 56 回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表
70	Role of Threonine residues in ion permeation for the Na ⁺ driven flagellar motor PomA/PomB: insights from MD simulations	Yasushi Onoue 1, Masayo Iwaki 2, Ai Shinobu 3, Yasutaka Nishihara 4, Hiroto Iwatsuki 1, Hiroyuki Terashima 1, Akio Kitao 3, Hideki Kandori 2, Michio Homma 1 (1 Nagoya Univ., 2 Nitech, 3 Tokyo Tech, 4	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表

71	レプリカ交換とGaussian accelerated MDを組合せた自由エネルギー計算法の開発	尾嶋 拓(理化学研究所 生命機能科学研究センター), 李秀栄(理化学研究所 生命機能科学研究センター), 杉田有治(理化学研究所 生命機能科学研究センター)	日本物理学会2018年秋季大会	2018年9月	口頭発表	
72	Ab initio evaluation of redox potential of metalloprotein	Cheng Cheng(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表	
73	Chromatin remodelers couple inchworm motion with twist-defect formation to slide nucleosomal DNA	Giovanni Brandani(Kyoto University), Shoji Takada(Kyoto University)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表	
74	Combinatorial DNA Binding of Sox/Oct Transcription Factors Studied with Molecular Dynamics Simulations	Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表	
75	Implicit Solvent Coarse-Grained Lipid Model for Molecular Simulations of Multicomponent Membrane Systems	Diego Ugarte(Kyoto University), Shoji	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表	
76	Investigating Genome Organization and Regulation with Coarse-Grained Molecular Simulations	Cheng Tan(Kyoto University), Shoji	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	招待講演	
77	Molecular simulation on light-activation mechanism of LOV photoreceptor protein	Masahiko Taguchi(Kyoto University), Cheng Cheng(Kyoto University), Chika Higashimura(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表	
78	Theoretical study on molecular mechanism of a light-driven ion transport of Halorhodopsin	Ryo Oyama(Kyoto University), Taisuke Hasegawa(Kyoto University), Shigehiko	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表	
79	V字型アントラセンパネルを持つ両親媒性分子の分子動力学シミュレーション	田口真彦(京都大学), 山本裕生(京都大学), 田中大地(京都大学), 林重彦(京都大)	第12回分子科学討論会	2018年9月	口頭発表	
80	ヌクレオソームと転写制御の動構造: 分子シミュレーションによるアプローチ	Shoji Takada(Kyoto University)	大阪大学蛋白質研究所セミナー: 構造生物学	2018年9月	招待講演	
81	ヘテロクロマチンタンパク質1のジ・ヌクレオソームへの結合: 分子シミュレーションによる解析	Shoji Takada(Kyoto University)	第91回日本生化学会大会	2018年9月	招待講演	
82	ダイナミックドッキングによる結合親和性予測	李秀栄(理化学研究所)	CBI2018年大会	2018年10月	招待講演	
83	Molecular Simulations for Understanding Protein Functions in Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN)	The 41st Annual Meeting of the Molecular Biology Society of Japan	2018年11月	招待講演	

4. 研究会等

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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	分子動力学ソフトウェアGENESISの開発と細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション	杉田有治(RIKEN TMS, AICS, iTHES)	第9回シグナルネットワーク研究会	2017年6月	招待講演	
2	Free energy-based drug discovery using MD simulation with HPC: Development	Hiraku Oshima(RIKEN QBiC)	RIKEN Kansai Joint Retreat 2017	2017年7月	ポスター発表	
3	Free energy-based drug discovery using MD simulation with high performance computing: Application	Suyong Re (RIKEN QBiC)	RIKEN Kansai Joint Retreat 2017	2017年7月	ポスター発表	
4	Flexible Docking using Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulation	Suyong Re (RIKEN QBiC), Hiraku Oshima (RIKEN QBiC), Motoshi Kamiya (RIKEN AICS), and Yuji Sugita (RIKEN QBiC, RIKEN)	第3回 ポスト「京」重点課題1ワークショップ	2017年8月	口頭発表	
5	Understanding and designing color variants of retinal binding proteins by molecular simulations	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	Telluride Science Research Center Workshop on "Protein Dynamics"	2017年8月	招待講演	

6	バクテリア細胞質の全原子分子動力学シミュレーションによる分子ダイナミクスの解析	杉田有治(RIKEN TMS, AICS, QBiC)	第4回森野ディスカッション	2017年8月	口頭発表	
7	分子動力学ソフトウェアGENESISの開発と生体分子系のシミュレーション	杉田有治(RIKEN TMS, AICS, QBiC)	第3回重点課題1ワークショップ	2017年8月	口頭発表	
8	Theoretical Understanding and Design of Molecular Functions of Proteins	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	第912回分子研コロキウム	2017年12月	招待講演	
9	リガンド・蛋白質構造変化を考慮した自由エネルギー計算法の開発と応用	尾嶋 拓(理化学研究所 生命システム研究センター)	近畿化学協会コンピュータ化学部会 公開講演会(第101回例会)	2018年2月	招待講演	
10	細胞環境を考慮した分子ダイナミクスと創薬応用計算	杉田有治(RIKEN TMS, AICS, QBiC)	産総研バイオメディカル研究部門セミナー	2018年2月	招待講演	
11	MD simulations and cryo-EM flexible fitting of biomolecular systems	Yuji Sugita (RIKEN) and Takaharu Mori (RIKEN)	Pioneering Project "Dynamic Structural Biology" 第2回研究報告会	2018年4月	招待講演	
12	An accurate evaluation of protein-protein complex models and a simple prediction of protein-ligand complex structures	Kazuhiro Takemura(Tokyo Institute of Technology)	Advance in Structural Biology and Beyond	2018年5月	招待講演	
13	Molecular Mechanisms for Protein-Ligand Binding studied by Molecular Dynamics Simulations	Suyong Re (RIKEN), Hiraku Oshima (RIKEN), Motoshi Kamiya (RIKEN), Yuji Sugita (RIKEN)	Seminar at Centre of New Technologies, University of Warsaw (Hosted by Prof. Joanna Trylska)	2018年5月	口頭発表	
14	実験データとシミュレーションを融合して蛋白質の構造変化を理解する手法の開発	Yuji Sugita (RIKEN)	新学術領域研究「動的構造生命」班会議	2018年6月	招待講演	
15	Ab initio evaluation of redox potential of metalloprotein	Cheng Cheng(Kyoto University), Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	新学術領域「革新的光物質変換」班会議	2018年6月	ポスター発表	
16	Recent Progress on Biomolecular Dynamics Simulations in Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN)	R-CCS Cafe	2018年8月	招待講演	
17	evERdock: refined with MD optimization, accelerated with machine learning	信夫愛(東京工業大学生命理工学院)	第5回ポスト「京」重点課題1WS	2018年8月	口頭発表	
18	HIV-1 proteaseの基質および反応阻害剤に関する分子シミュレーションと水溶性光受容タンパク質の光活性化機構に関する分子シミュレーション	山口真彦(京都大学), 金曾将弘(京都大学), 小山糧(京都大学), 成セイ(京都大学), 東村智佳(京都大学), 林重彦(京都大学)	第5回ポスト京 重点課題1 ワークショップ	2018年8月	口頭発表	
19	Protein-ligand binding in crowded environments	Kento Kasahara, Hiraku Oshima, Suyong Re, Yuji Sugita(RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research), Yuji Sugita(RIKEN Center for Computational Science), Yuji Sugita(RIKEN Theoretical Molecular Science)	第5回ポスト「京」重点課題1ワークショップ	2018年8月	口頭発表	
20	Functional molecular dynamics of rhodopsins revealed by hybrid molecular simulations	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	18th International Conference on Retinal Proteins	2018年9月	招待講演	
21	マルチスケール・フィジクスで見えてくる生体高分子のダイナミクスと機能機序	林重彦(京都大学)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	招待講演	
22	Functional Molecular Dynamics of Photo-Receptor Proteins Revealed by a Hybrid Molecular Simulation Technique	Shigehiko Hayashi(Kyoto University)	Indo-Japan mini-workshop "Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications in Chemistry"	2018年10月	招待講演	
23	柔らかな分子がもたらす分子機能の理解と設計	林重彦(京都大学)	近畿化学協会コンピュータ化学部会(第103回例会)公開講演会	2018年10月	招待講演	
24	Investigating protein complex formation and dissociation in silico	Akio Kitao(Tokyo Institute of Technology)	Ho Chi Minh City University of Technology Seminar	2018年11月	招待講演	
25	コンピュータで観るタンパク質複合体の形成と解離	北尾彰朗(東京工業大学)	シンポジウム「理論生物物理学の現在と未来」	2019年2月	口頭発表	
26	ハロドブシン Cl ⁻ イオンポンプの光活性化の分子機構に関する理論的研究	小山 糧(京都大学), 長谷川太佑(京都大学), 林 重彦(京都大学)	第16回 京都大学 福井謙一記念研究センターシンポジウム	2019年2月	ポスター発表	

27	分子シミュレーションによる AsLOV2 光受容タンパク質の光活性化中間状態	田口 真彦(京都大学), 成 Cheng(京都大学), 東村 智佳(京都大学), 内田 芳裕(京都大学), 林 重彦(京都大学)	第 16 回 京都大学 福井謙一記念研究センターシンポジウム	2019年2月	ポスター発表	
----	--	--	--------------------------------	---------	--------	--

5. 一般向け講演会

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(講演会名等)	発表した時期	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	Machine Learning Approach to Link Single-Molecule FRET and Molecular Dynamics for Understanding Protein Folding Dynamics	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS) and Yasuhiro Matsunaga (RIKEN AICS)	Seminar at Department of Biochemistry (Michigan State University)	2017年7月	口頭発表	○
2	Protein Diffusion, Dynamics, Stability in Cellular Environments	Yuji Sugita (RIKEN TMS, AICS, QBiC, iTHES)	Seminar at National Institutes of Health (NIH)	2017年7月	口頭発表	○

6. 新聞/TV/WEB配信/広報誌/雑誌/等のメディア

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(書籍名等)	発表した時期		
1	糖鎖構造から衝突断面積を予測 - 精密な糖鎖構造決定への新	杉田有治(理化学研究所), 李秀栄(理化学研究所), 渡部茂久(理化学研究所), 二島涉(理化学研究所), 山口 芳樹(理化学研究所), 宗行 英朗(中央大学), Alexander D. MacKerell Jr.(米国メリーラン)	理研広報(プレスリリース)、日本経済新聞	2018年2月		

7. 書籍

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(書籍名等)	発表した時期		
1	Chapter 10. Structure of the MotA/B Proton Channel	Akio Kitao(The University of Tokyo), Yasutaka Nishihara(The University of	Humana Press, Methods in Molecular Biology Vol.1593, "The Bacterial Flagellum. Methods and Protocols", Pages 133-145	2017年5月		

サブ課題B: 次世代創薬計算技術の開発

サブ課題代表者: 池口 満徳

1. 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	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)	招待講演(○を記)
1	Coarse-grained molecular dynamics study of membrane fusion: Curvature effects on free energy barriers along the stalk mechanism	Shuhei Kawamoto(Nagoya University), Michael L. Klein(Temple University), Wataru Shinoda(Nagoya University)	The Journal of Chemical Physics, Vol. 143, 243112 (2015)	2015年10月	英語		
2	Apo- and Antagonist-Binding Structures of Vitamin D Receptor Ligand-Binding Domain Revealed by Hybrid Approach Combining Small-Angle X-ray Scattering and Molecular Dynamics	Anami Y, Egawa D, Itoh T, Yamamoto K(Showa Pharmaceutical University), Shimizu N(Photon Factory, Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization)	J Med Chem., 59, 7888-900	2016年9月	英語		
3	Towards Physical Understanding of Molecular Recognition in the Cell: Recent Evolution of Molecular Dynamics Techniques and Free Energy Theories	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	Biomedical Sciences 2016; 2(5): 34-47 doi: 10.11648/j.bs.20160205.11	2016年11月	英語		
4	Computational Methods for Configurational Entropy Using Internal and Cartesian Coordinates	Hikiri S, Yoshidome T, Ikeguchi M(Yokohama City University)	J Chem Theory Comput., 12, 5990-6000	2016年12月	英語		
5	ヌクレオソーム中におけるH3ヒストンテールの構造とアセチル化の影響	池部仁善(量研機構), 櫻庭俊(東大), 河野秀俊(量研機構)	日本生物物理学会誌 2017, 57 (2), 095-097.	2017年2月	日本語		

6	Rotation Mechanism of Molecular Motor V-1-ATPase Studied by Multiscale Molecular Dynamics Simulation	Yuta Isaka(Yokohama City University), Toru Ekimoto(Yokohama City University), Yuichi Kokabu(Yokohama City University), Ichiro Yamato(Tokyo University of Science), Takeshi	Biophysical Journal, 112, 911-920	2017年3月	英語		
7	京速コンピューティングによる創薬への挑戦: ポスト「京」時代に向けて	山下雄史(東京大学)	分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」19(2) 81-87 (2017)	2017年4月	日本語		
8	創薬基盤としての分子動力学シミュレーション技術	藤谷秀章(東京大学 先端科学技術研究センター)	学術の動向, 22巻(2017) 7号 p. 7.58-7.61	2017年7月	日本語		
9	H4 Tails Potentially Produce the Diversity in the Orientation of Two Nucleosomes	Ishida, Hisashi; Kono, Hidetoshi(Molecular Modeling and Simulation Group, Quantum Beam Science Research Directorate, National Institutes fo Quantum and RadiologicalScience and Technology)	BIOPHYSICAL JOURNAL, Vol.113-5 (2017), pp.978-990	2017年9月	英語		
10	高速分子動力学シミュレーションと創薬	藤谷 秀章(東京大学 先端科学技術研究センター)	日本シミュレーション学会誌 「シミュレーション」Vol.36 No.3 pp16-21	2017年9月	日本語		
11	Covalent modifications of histone H3K9 promote binding of CHD3	Adam H. Tencer(Department of Pharmacology, University of Colorado School of Medicine), Khan L. Cox(Department of Physics, Ohio State University), Luo Di(Molecular Modeling and Simulation Group, Natinal	Cell Reports, Vol.21, pp.455-466 (2017)	2017年10月	英語		

12	Accessibility of the histone H3 tail in the nucleosome for binding of paired readers	Jovylyn Gatchalian(Department of Pharmacology, University of Colorado School of Medicine, Aurora, CO 80045, USA.), Xiaodong Wang(Department of Biochemistry and	Nature Communications, Vol.8, 1489(2017)	2017年11月	英語		
13	An Ensemble Docking Calculation of Lysozyme and HyHEL-10: Insight into the Binding Mechanism	Takefumi Yamashita, Yuichiro Takamatsu(the University of Tokyo)	PROCEEDINGS OF THE INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING 2017 (ICCMSE-2017), Vol 1906 p030022 (2017)	2017年12月	英語		
14	Initiation of prolyl cis-trans isomerisation in the CDR-H3 loop of an antibody in response to antigen binding	Keiko Shinoda(RCAST, The University of Tokyo), Hideaki Fujitani(RCAST, The University of Tokyo)	Scientific Reports 7(1):16964 (2017)	2017年12月	英語		
15	Identification of Factors Promoting HBV Capsid Self-Assembly by Assembly-Promoting Antivirals	Soumya Lipsa Rath(Nagoya University, Department of Materials Chemistry), Huihui Liu(Nagoya University, Department of Materials Chemistry), Susumu Okazaki(Nagoya University, Department of Materials	J. Chem. Info. Mod. vol.58. 328-337	2018年1月	英語		
16	Free energy profiles for unwrapping the outer superhelical turn of nucleosomal DNA	Hidetoshi Kono(QST), Shun Sakuraba(Univ. of Tokyo), Hisashi Ishida(QST)	PLOS Computational Biology, Vol.14, pp.e1006024 (2018)	2018年3月	英語		
17	Toward rational antibody design: recent advancements in molecular dynamics simulations	Takefumi Yamashita(The University of Tokyo)	International Immunology, Vol. 30, No. 4, pp. 133-140	2018年4月	英語		

18	Multiscale Molecular Dynamics Simulations of Rotary Motor Proteins	Toru Ekimoto(Yokohama City University), Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University)	Biophys. Rev., 10, 605-615	2018年4月	英語		
19	MNase, as a probe to study the sequence-dependent site exposures in the+1 nucleosomes of yeast	Di Luo(Molecular Modeling and Simulation Group,Department of Quantum Beam Life Science,National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology, Kizugawa,	Nucleic Acids Research, Vol.46, pp.7124-7137 (2018)	2018年6月	英語		
20	Multiplicity in Long Noncoding RNA in Living Cells	Riki Kurokawa(Saitama Medical University), Reina Komiya(Okinawa Institute Science and Technology Graduate University), Takanori Oyoshi(Shizuoka University.), Yoko Matsuno(Niigata University.),	Biomedical Sciences 2018; 4(2): 18-23	2018年8月	英語		
21	Investigating the Influence of Arginine Dimethylation on Nucleosome Dynamics Using All-Atom Simulations and Kinetic Analysis	Zhenhai Li(Molecular Modeling and Simulation (MMS) Group, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology (QST), 8-1-7, Umemidai, Kizugawa, Kyoto 619-0215, Japan), Hidetoshi	The Journal of Physical Chemistry B, Vol.122, pp.9625-9634 (2018)	2018年9月	英語		
22	Efficiency strategy for peptide design: A comparative study on all-atom, coarse-grained, and machine learning approaches	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo), Ryo Okajima(the University of Tokyo), Naoyuki Shoji(the University of Tokyo)	AIP Conference Proceedings 2040, 020014 (2018)	2018年11月	英語		
23	Liquid structures characterized by a combination of the persistent homology analysis and molecular dynamics simulation	Kohei Sasaki(the University of Tokyo), Ryo Okajima(the University of Tokyo), Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	AIP Conference Proceedings 2040, 020015 (2018)	2018年11月	英語		

24	Elimination of Finite-Size Effects on Binding Free Energies via the Warp-Drive Method	Toru Ekimoto(Yokohama City University), Tsutomu Yamane(Yokohama City University), Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University)	J. Chem. Theory Comput., 14, 6544-6559(2018)	2018年11月	英語		
25	SPICA Force Field for Lipid Membranes: Domain Formation Induced by Cholesterol	Sangjae Seo(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	J. Chem. Theory Comput. Vol. 15, pp. 762-774.	2018年12月	英語		
26	Affinity Improvement of a Cancer-Targeted Antibody through Alanine-Induced Adjustment of Antigen-Antibody Interface	Takefumi Yamashita, Takeshi Kawamura, Tatsuhiko Kodama, Hideaki Fujitani(Laboratory for Systems Biology and Medicine, Research Center for Advanced Science and Technology, The University	Structure 27, 1-9, March 5, 2019	2018年12月	英語		
27	Rotational Mechanism Model of the Bacterial V-1 Motor Based on Structural and Computational Analyses	Abhishek Singharoy(Arizona State University), Chris Chipot(Universite de Lorraine, University of Illinois at Urbana-Champaign), Toru Ekimoto(Yokohama City University), Kano	Front. Physiol. 10:46, 1-12 (2019)	2019年2月	英語		
28	Free energy analysis of membrane pore formation process in the presence of multiple melittin peptides	Yusuke Miyazaki, Susumu Okazaki, Wataru Shinoda(Nagoya University)	BBA-Biomembranes, in press	2019年3月	英語		

2. 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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	A MOLECULAR DYNAMICS CALCULATION STUDY OF POLIOVIRUS AND POLIOVIRUS RECEPTOR CD155	Yuta Endo, Keisuke Mizutani, Noriyuki Yoshii, Atsushi Yamada, Yoshimichi Andoh, Kazushi Fujimoto, Hidekazu Kojima, Wataru Shinoda(Nagoya University), Atsushi Nakagawa(Osaka University), Akio	The 2015 Conference on Foundations of Molecular Modeling and Simulation (FOMMS2015)	2015年7月	ポスター発表	

2	An accurate and efficient, computational method for the hydration free energy of large and complex molecules	Takashi Yoshidome, Toru Ekimoto, Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University), Nobuyuki Matubayasi(Osaka University), Yuichi Harano(Himeji Dokkyo University), Masahiro	Biophysical society 60th Annual Meeting	2016年2月	ポスター発表	
3	Water Pathway Analysis of Multi-Drug Efflux Transporter AcrB	Tsutomu Yamane, Akinori Kidera, Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University), Ryotaro Koike, Motonori Ota(Nagoya University), Satoshi Murakami(Tokyo Institute of Technology)	Biophysical society 60th Annual Meeting	2016年2月	ポスター発表	
4	Distinct Roles of Histone H3 and H2A Tails in Nucleosome Stability	Zhenhai Li(QST), Hidetoshi Kono(QST)	Chromatin Structure & Function, Gordon Conference	2016年5月	ポスター発表	
5	Role of Histone H3 and H2A Tails in Nucleosome Stability	Hidetoshi Kono(QST)	Colorado Chromatin Meeting	2016年8月	招待講演	
6	Molecular dynamics study of the interaction between poliovirus capsid and its receptor	Susumu Okazaki(Nagoya University, Department of Applied Chemistry)	Joint EMLG/JMLG Annual Meeting 2016	2016年9月	口頭発表	
7	All-atomistic molecular dynamics study of the interaction between poliovirus capsid and its receptor	K. Fujimoto(Nagoya University, Department of Applied Chemistry), K. Mizutani(Nagoya University, Department of Applied Chemistry), Y. Endoh(Nagoya University, Department of Applied	The 4th International Conference on Molecular Simulation	2016年10月	招待講演	

8	All-atomistic molecular dynamics study of the interaction between poliovirus capsid and its receptor	K.Fujimoto(Nagoya University, Department of Applied Chemistry), K.Mizutani(Nagoya University, Department of Applied Chemistry), Y.Endoh(Nagoya University, Department of Applied	The 4th International Conference on Molecular Simulation	2016年10月	招待講演	
9	Coarse-Grained Molecular Dynamics of Macromolecular Self-Assembly	Wataru Shinoda(Nagoya University, Department of Applied Chemistry)	The 4th International Conference on Molecular Simulation	2016年10月	口頭発表	
10	Coarse-Grained Molecular Simulations of Macromolecular Self-Assembly	Wataru Shinoda(Nagoya University, Department of Applied Chemistry)	10th International Conference on Computational Physics	2017年1月	口頭発表	
11	Molecular Dynamics Analysis of Protein Complex Structures	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	10th International Conference on Computational Physics (ICCP10)	2017年1月	招待講演	
12	On Quantitative Understanding on Antigen-Antibody Interaction through All-atom Molecular Dynamics Simulations	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	3rd Symposium on Biophysics Postgraduate Research in Hong Kong	2017年1月	招待講演	
13	Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain revealed by a combination analysis of MD simulations and SAXS experiments	Yasuaki Anami(Showa Pharmaceutical University), Nobutaka Shimizu(High Energy Accelerator Research Organization), Toru Ekimoto(Yokohama City University), Daichi Egawa(Showa	Biophysical society 61th annual meeting	2017年2月	ポスター発表	

14	Determination of the solution structure of isolated histone H2A-H2B heterodimer by using CS-Rosetta	Tsutomu Yamane, Yoshihito Moriwaki, Hideaki Ohtomo, Mitsunori Ikeguchi, Jun-ichi Kurita, Masahiko Sato, Aritake Nagadoi, Hideaki Shimojyo, Yoshifumi Nishimura(Yokohama City University)	Biophysical society 61th annual meeting	2017年2月	ポスター発表	
15	Rotation mechanism of molecular motor V1-ATPase elucidated by multiscale molecular dynamics simulation	Yuta Isaka(Yokohama City University), Toru Ekimoto(Yokohama City University), Yuichi Kokabu(Yokohama City University), Takeshi Murata(Chiba University), Mitsunori	Biophysical society 61th annual meeting	2017年2月	ポスター発表	
16	Distinct Roles of H3 and H2A tails in linker DNA dynamics	Zhenhai Li, Jinzen Ikebe(QST), Shun Sakuraba(Univ. of Tokyo), Hidetoshi Kono(QST)	Biophysical Society 61th Annual Meeting	2017年2月	ポスター発表	
17	MOLECULAR DYNAMICS STUDY FOR STREPTAVIDIN MUTANT WITH/WITHOUT BIOTIN ANALOG	Keiko Shinoda, Hideaki Fujitani(RCAST, The Univ. of Tokyo)	61st Annual Meeting of the Biophysical Society	2017年2月	ポスター発表	
18	THE FREE-ENERGY LANDSCAPE OF THE DI-NUCLEOSOME: A CRITICAL ROLE OF THE H4 TAILS FOR THE NUCLEOSOME-NUCLEOSOME CONFORMATION	Hisashi Ishida, Hidetoshi Kono(QST)	Biophysical Society 61th Annual Meeting	2017年2月	ポスター発表	
19	A Molecular Dynamics Study on Antigen-Antibody Recognition	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	13th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (CC symposium of ICCMSE 2017)	2017年4月	招待講演	

20	Free energy analysis of topological and morphological deformation of membranes	Wataru Shinoda(Nagoya University, Department of Materials Chemistry)	The future of biomembrane simulations: hidden pitfalls and future challenges	2017年6月	招待講演	
21	A coarse-grained force field for lipid phase separation simulations	Sangjae Seo(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	The future of biomembrane simulations: hidden pitfalls and future challenges	2017年6月	ポスター発表	
22	Refined AMBER force field (FUJI) for phospholipids	Nozomu Kamiya(FUJITSU), Hideaki Fujitani(The University of Tokyo)	American Chemical Society 253rd National Meeting	2017年6月	口頭発表	
23	Biosupercomputing in Japan	Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University)	The 5th Asia Pacific Protein Association Conference	2017年7月	招待講演	
24	Molecular dynamics simulations of molecular rotary motors	Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University)	The 5th Asia Pacific Protein Association Conference	2017年7月	招待講演	
25	Impact of post-translational modifications on the structure and dynamics of nucleosome	Hidetoshi Kono, Luo Di(Molecular Modeling and Simulation Group, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)	1st QST International Symposium Quantum Life Science	2017年7月	ポスター発表	

26	MNase, as a probe to study the sequence-dependent site exposure in the +1 nucleosomes of yeast	Luo Di, Hidetoshi Kono(Molecular Modeling and Simulation, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)	1st QST International Symposium Quantum Life Science	2017年7月	ポスター発表
27	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF STREPTAVIDIN MUTANT-BIOTIN ANALOG SYSTEMS	Keiko Shinoda(RCAST, The Univ. of Tokyo), Hideaki Fujitani(RCAST, The Univ. of Tokyo)	19th International Union of Pure and Applied Biophysics (IUPAB) and 11th European Biophysical Societies' Association (EBSA) Congress	2017年7月	ポスター発表
28	Free energy analysis of the Nucleosome-Nucleosome interaction analyzed by Biomolecular Simulations	Hisashi Ishida, Hidetoshi Kono(Molecular Modeling and Simulation Group, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology)	1st QST International Symposium Quantum Life Science	2017年7月	ポスター発表
29	All-atomistic Molecular Dynamics Study of Viruses using K-computer	Susumu Okazaki(Nagoya University, Graduate School of Engineering)	Joint EMLG/JMLG Meeting 2017	2017年9月	招待講演
30	Free energy analysis of topological and morphological changes in lipid membranes	Wataru Shinoda(Nagoya University, Graduate School of Engineering)	Joint EMLG/JMLG Meeting 2017	2017年9月	口頭発表
31	New lipid force fields to include anisotropic membrane characters	Hideaki Fujitani(The University of Tokyo, RCAST), Keiko Shinoda(The University of Tokyo, RCAST), Nozomu Kamiya(Fujitsu)	Second Adriatic Symposium on Biophysical Approaches in Biomedical Studies	2017年9月	口頭発表

32	Coarse-Grained Molecular Simulation of Lipid Membranes: Free Energy Analyses of morphological and topological changes	Wataru Shinoda(Nagoya University, Department of Materials Chemistry)	Frontiers in Computational Biophysics: understanding conformational dynamics of complex lipid mixtures relevant to biology	2018年1月	招待講演
33	REFINED AMBER FORCE FIELD (FUJI) FORCE FIELD FOR PHOSPHOLIPIDS AND THE APPLICATION TO ACRB TRANSPORTER EMBEDDED IN POPE BILAYER	Keiko Shinoda(RCAST, The University of Tokyo), Hideaki Fujitani(RCAST, The University of Tokyo)	62nd Annual Meeting Biophysical Society	2018年2月	ポスター発表
34	Molecular dynamics analysis of drastic structure changes of an antibody on the binding process to its antigen	Keiko Shinoda(Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo), Hideaki Fujitani(Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo)	Gordon Research Conference: Antibody Biology and Engineering	2018年3月	ポスター発表
35	Structural effects on the antigen-antibody interaction: Insight from molecular dynamics simulations of biopolymers	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	14th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (CC symposium of ICCMSE 2017)	2018年3月	招待講演
36	MNase, as a probe to study the sequence-dependent site exposures in the +1 nucleosomes of yeast	Di Luo(QST), Hidetoshi Kono(QST)	Cold Spring Harbor Asia conference on Chromatin, Epigenetics & Transcription	2018年4月	ポスター発表
37	Molecular dynamics in the antibody-antigen recognition	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	Symposium on Eukaryotic Regulatory Biology in honor of M. Geoffrey Rosenfeld	2018年8月	招待講演

38	Molecular dynamics simulations of multidrug efflux transport complex AcrAB-TolC embedded in lipid bilayers	Keiko Shinoda(Research Center for Advanced Science and Technology ,University Of Tokyo), Hideaki Fujitani(Research Center for Advanced Science and Technology ,University Of Tokyo)	256th ACS National Meeting	2018年8月	ポスター発表	
39	A novel polar coarse-grained water model for molecular dynamics simulations of lipid membrane systems	Yusuke Miyazaki(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Susumu Okazaki(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	ポスター発表	
40	Elucidation of physical properties of hepatitis B virus containing pregenome RNA by molecular dynamics simulation	Youhei Yamaguchi(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Hajime Imai, Kazushi Fujimoto(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Ryo	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	ポスター発表	
41	Free energy calculation on the permeation of the ionic drug across the lipid membrane	Miyu Tamura(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Susumu Okazaki(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	ポスター発表	
42	Coarse-grained molecular simulation study of liposomal stability	Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	6th European Joint Theoretical/ Experimental Meeting on Membranes (EJTEMM2018)	2018年12月	招待講演	
43	Effect of interface structure on the binding affinity of proteins: A molecular dynamics study	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	IMS symposium "Water at interfaces 2018"	2019年1月	ポスター発表	

44	ELIMINATION OF FINITE-SIZE EFFECTS ON BINDING FREE ENERGIES BY THE WARP-DRIVE METHOD	Toru Ekimoto(Yokohama City University), Tsutomu Yamane(Yokohama City University), Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University, RIKEN)	Biophysical Society 63th Annual Meeting	2019年3月	ポスター発表	
45	Sequence-Dependent Asymmetric Unwrapping of nucleosomes of yeast	Luo, D.(Nat. Inst. for Quantum and Radiological Sci. and Tech.), Kato, D.(Waseda Univ.), Nogami, J.(Kyushu Univ.), Ohkawa, Y.(Kyushu Univ.), Kurumizaka, H.(Univ. of Tokyo), Kono, H.(Nat. Inst.	The 63rd Annual Meeting of the Biophysical Society	2019年3月	ポスター発表	

3. 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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	MD-SAXS analysis for biomolecules	Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City University)	The wwPDB Symposium, Integrative Structural Biology with Hybrid Methods	2015年10月	招待講演	
2	MD-SAXSによるタンパク質構造のゆらぎ解析	池口満徳, 小甲裕一, 佐藤衛(横浜市立大学)	日本結晶学会年会	2015年10月	招待講演	
3	粗視化分子モデリング: 膜タンパクへの拡張	川本周平(名古屋大学工学研究科 化学・生物工学専攻), 篠田 渉(名古屋大学工学研究科 化学・生物工学専攻)	第29回分子シミュレーション討論会	2015年11月	口頭発表	
4	分子動力学計算とX線小角散乱の連携によるタンパク質の動的構造解析	池口満徳(横浜市立大学)	日本農芸化学会2016年度大会	2016年3月	招待講演	

5	分子シミュレーションを用いた生体超分子の構造・機能解析に向けて	篠田恵子(東大先端研)	LSBM Symposium 2016 超分子構造の計算科学	2016年5月	口頭発表
6	PDE10A阻害剤の結合能のin silico解析	湯浅千紗, 小甲裕一, 山根努, 浴本亨, 池口満徳(横浜市立大学)	第16回蛋白質科学会年会	2016年6月	ポスター発表
7	マルチスケール解析によるV1-ATPaseの回転機構の解明	井阪悠太, 浴本亨, 小甲裕一, 池口満徳(横浜市立大学), 村田武士(千葉大学)	第16回蛋白質科学会年会	2016年6月	ポスター発表
8	分子動力学計算(MD)とX線小角散乱実験(SAXS)を組み合わせたMD-SAXS法による赤痢菌エフェクター蛋白質IpaH1880とIpaH3の溶液構造解析	浴本亨, 池口満徳(横浜市立大学), 西出旭, 水島恒裕(兵庫県立大学), 桑原直之, 加藤龍一(高エネルギー加速器研究機構), Kim Minsoo(京都大学)	第16回蛋白質科学会年会	2016年6月	ポスター発表
9	回転分子モーターの分子動力学シミュレーション	池口満徳(横浜市立大学)	日本蛋白質科学会第16回年会	2016年6月	招待講演
10	神経軸索伸長ガイダンス分子セマフォリンと受容体プレキシンのタンパク質複合体の分子モデリング	下地恵令奈, 山根努, 浴本亨, 禾晃和, 池口満徳(横浜市立大学)	第16回蛋白質科学会年会	2016年6月	ポスター発表

11	抗原結合によって誘起される抗体のプロリンスイッチ:分子動力学シミュレーションからの考察	篠田恵子、藤谷秀章(東大先端研)	第16回日本蛋白質科学会年会	2016年6月	ポスター発表
12	MD-SAXS相関構造解析による蛋白質の溶液構造解析	浴本亨, 池口満徳(横浜市立大学)	第89回日本生化学会大会	2016年9月	招待講演
13	Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain in solution studied by MD and SAXS hybrid approach.	穴見康昭, 江川大地, 伊藤俊将, 山本恵子(昭和薬科大学), 清水伸隆(高エネルギー加速器研究機構), 浴本亨, 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2016年大会	2016年10月	ポスター発表
14	分子動力学シミュレーションとX線小角散乱法を組み合わせた手法による、ビタミンD受容体リガンド結合ドメインのアポ体及びアンタゴニスト複合体の溶液構造探索	浴本亨, 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2016年大会	2016年10月	招待講演
15	多剤排出トランスポーターAcrBの分子シミュレーション	池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2016年大会	2016年10月	招待講演
16	全原子MDと粗視化MDを組み合わせたマルチスケールMD解析によるV1-ATPaseの回転機構の解明	井阪悠太, 浴本亨, 小甲裕一, 池口満徳(横浜市立大学), 村田武士(千葉大学)	第54回日本生物物理学会	2016年11月	ポスター発表

17	分子動力学シミュレーションとX線溶液散乱法の連携によるタンパク質動的構造解析	池口満徳(横浜市立大学)	第44回構造活性相関シンポジウム・第31回農薬デザイン研究会	2016年11月	招待講演
18	溶質構造エントロピー計算法の理論的研究	肥喜里志門, 池口満徳(横浜市立大学), 吉留崇(東北大学)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表
19	Effects of cumulative acetylation in histone H3 tail studied by an enhanced conformational sampling MD simulation	Jinzen Ikebe(QST), Shun Sakuraba(Univ. of Tokyo), Hidetoshi Kono(QST)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表
20	ポリオウィルス-レセプター間相互作用の分子論的研究	藤本和士(名古屋大学工学研究科), 水谷圭介(名古屋大学工学研究科), 小嶋秀和(名古屋大学工学研究科), 山田篤志(名古屋大学工学研究科), 安藤嘉倫(名古屋大学工学研究科), 吉井範行(名古屋大学工学研究科),	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月	口頭発表
21	分子動力学シミュレーションによる膜の細孔形成自由エネルギー解析	宮崎裕介(名古屋大学工学研究科), 篠田渉(名古屋大学工学研究科), 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表
22	分子動力学法による抗B型肝炎ウイルス薬の機能解明に向けた力場開発	深井基裕(名古屋大学工学研究科), 藤本和士(名古屋大学工学研究科), 篠田渉(名古屋大学工学研究科), 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月	ポスター発表

23	分子動力学法を用いた抗B型肝炎ウイルス薬の力場開発	深井基裕(名古屋大学工学研究科), 藤本和士(名古屋大学工学研究科), 篠田渉(名古屋大学工学研究科), 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第39回溶液化学シンポジウム	2016年11月	ポスター発表
24	分子動力学法を用いた脂質膜における細孔形成過程の自由エネルギー解析	宮崎裕介(名古屋大学工学研究科), 篠田渉(名古屋大学工学研究科), 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月	ポスター発表
25	分子動力学計算を用いた、ポリオウイルスのCD155レセプター結合の研究	藤本和士(名古屋大学工学研究科), 小嶋秀和(名古屋大学工学研究科), 水谷圭佑(名古屋大学工学研究科), 遠藤裕太(名古屋大学工学研究科), 山田篤志(名古屋大学工学研究科), 安藤嘉倫(名古屋大学工学研究科)	第39回溶液化学シンポジウム	2016年11月	口頭発表
26	電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される負圧の分子論的解明	島航平(名古屋大学工学研究科), 小嶋秀和(名古屋大学工学研究科), 藤本和士(名古屋大学工学研究科), 篠田渉(名古屋大学工学研究科), 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月	ポスター発表
27	Advancement and challenge in the all-atom molecular dynamics simulation for biomolecular systems	Takefumi Yamashita(Univ. Tokyo)	第39回日本分子生物学会年会 (Symposium: Integration of leading-edge technologies induces insight into physiology of long noncoding RNA and possibilities of therapeutics)	2017年1月	招待講演
28	創薬基盤としての分子動力学シミュレーション技術	藤谷 秀章(東京大学 先端科学技術研究センター)	日本学術会議 薬学委員会 生物系薬学分子科学シンポジウム	2017年1月	招待講演

29	ストレプトアビジン改変体一人エビオチンのMDシミュレーション	篠田恵子、藤谷秀章(東京大先端研)	第72回日本物理学会年会	2017年3月	口頭発表
30	分子動力学計算による 抗原抗体複合体の形成過程の研究	山下雄史(東京大学), 高松佑一郎(東京大学)	日本化学会春季年会	2017年3月	口頭発表
31	抗原抗体界面における塩橋安定性の分子動力学計算による研究	岡島亮、山下雄史(東京大学)	第20回理論化学討論会	2017年5月	ポスター発表
32	脂質膜における細孔形成過程の定量的解析法の探究	宮崎裕介、篠田渉、岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第10回分子科学討論会	2017年5月	ポスター発表
33	Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain in solution revealed by MD and SAXS hybrid approach	Toru Ekimoto(Yokohama City University), Yasuaki Anami(Showa Pharmaceutical University), Nobutaka Shimizu(High Energy Accelerator Research Organization), Daichi Egawa(Showa)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	招待講演
34	X線小角散乱実験と分子動力学計算を組み合わせた相関構造解析による蛋白質の溶液構造解析	浴本亨、池口満徳(横浜市立大学)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	招待講演

35	ホスホジエステラーゼ(PDE)-10Aのin silicoリガンド結合解析	湯浅千紗, 浴本亨, 山根努, 池口満徳(横浜市立大学)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	ポスター発表
36	神経軸索ガイダンス分子セマフォリンと受容体の相互作用のin silico解析	下地恵令奈, 山根努, 浴本亨, 禾晃和, 池口満徳(横浜市立大学)	第17回日本蛋白質科学会年会	2017年6月	ポスター発表
37	ヒストンH3翻訳後修飾のヌクレオソーム動態に与える影響	河野 秀俊(量子科学技術研究開発機構)	日本蛋白質科学会	2017年6月	招待講演
38	抗原-抗体系におけるプロリン・スイッチ	篠田恵子(東大先端研), 藤谷秀章(東大先端研)	第3回ポスト「京」重点課題1ワークショップ	2017年8月	口頭発表
39	Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain elucidated by SAXS experiments and MD simulations	穴見康昭(昭和薬科大学), 清水伸隆(高エネルギー加速器研究機構), 浴本亨(横浜市立大学), 江川大地(昭和薬科大学), 伊藤俊将(昭和薬科大学), 池口満徳(横浜市立大学), 山本恵子(昭和薬科大学)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表
40	Protein dynamics revealed by a combination analysis of molecular dynamics (MD) simulations and small-angle x-ray scattering (SAXS) experiments	Toru Ekimoto(Yokohama City Univ.), Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City Univ.)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	招待講演

41	Free energy calculations of melittin pore formation in lipid membranes with molecular dynamics simulations	Yusuke Miyazaki, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki(Nagoya University, Graduate School of Engineering)	第55回生物物理学会	2017年9月	ポスター発表
42	Molecular Environment effects on the protein structure: Molecular dynamics studies on the antigen-antibody interface	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	生物物理学会	2017年9月	招待講演
43	ウイルス粒子の全原子分子動力学シミュレーションー電解質水溶液中の荷電粒子について	岡崎進(名古屋大学工学研究科)	コロイドおよび界面化学討論会	2017年9月	口頭発表
44	分子動力学法を用いたメリテンペプチドによる膜細孔形成の自由エネルギー計算	宮崎裕介, 篠田渉, 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第11回分子科学討論会	2017年9月	口頭発表
45	分子動力学計算による抗原と抗体の結合過程の研究	山下雄史(東京大学), 高松 佐一郎(東京大学)	分子科学討論会	2017年9月	口頭発表
46	分子動力学計算による抗原抗体界面環境の塩橋安定性への効果に関する研究	岡島亮, 山下雄史(東京大学)	分子科学討論会	2017年9月	ポスター発表

47	電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される負圧の分子論的解明	島航平,小嶋秀和,藤本和士, 篠田渉,岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第11回分子科学討論会	2017年9月	ポスター発表	
48	Molecular dynamics simulations for the study of thermodynamic properties in streptavidin mutant-biotin analog	Keiko Shinoda(RCAST, The Univ. of Tokyo), Hideaki Fujitani(RCAST, The Univ. of Tokyo)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	招待講演	
49	脂質膜融合過程の自由エネルギー解析	篠田渉, Sangjae Seo, 川本周平(名古屋大学工学部応用物質化学専攻)	第11回分子科学討論会	2017年9月	口頭発表	
50	Finite-size effect on the charging free energy in the alchemical perturbation and ``warp drive'' method	浴本亨(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2017年大会	2017年10月	口頭発表&ポスター発表	
51	In silico binding affinity analysis for phosphodiesterase-10A inhibitors	湯浅千紗(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2017年大会	2017年10月	ポスター発表	
52	In silico protein design for functional modification of the photoactivated adenylate cyclase	田中真結(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 大木規央(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 朴三用(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2017年大会	2017年10月	ポスター発表	

53	In silico protein-protein interaction analysis of axon guidance molecule semaphorin and receptor plexin	下地恵令奈(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 禾晃和(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2017年大会	2017年10月	ポスター発表	
54	分子動力学法を用いた抗B型肝炎薬のウイルスカプシド透過機構解明	深井基裕, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第40回溶液化学シンポジウム	2017年10月	ポスター発表	
55	電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される負圧の分子論的解明	島航平, 小嶋秀和, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進(名古屋大学工学研究科)	第40回溶液化学シンポジウム	2017年10月	ポスター発表	
56	pg-RNAを内包したB型肝炎ウイルスの全原子分子動力学シミュレーション	山口陽平, 今井甫, 藤本和士, 浦野諒, 尾曲克己, 田中靖人, 石川哲也, 中川敦史, 篠田渉, 岡崎進	第31回分子シミュレーション討論会	2017年11月	ポスター発表	
57	分子動力学法による電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される負圧の分子論的解明	島航平, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進(名古屋大学工学部応用物質化学専攻)	第31回分子シミュレーション討論会	2017年11月	ポスター発表	
58	分子動力学法を用いた抗B型肝炎薬のウイルスカプシド透過機構の研究	深井基裕, 浦野諒, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進(名古屋大学工学部応用物質化学専攻)	第31回分子シミュレーション討論会	2017年11月	ポスター発表	

59	ストレプトアビジン改変体-人工エピオチンの分子動力学シミュレーション: より良い創薬を目指して	篠田恵子(東大先端研), 藤谷秀章(東大先端研)	2017年度生命科学系学会合同年次大会 (ConBio2017)	2017年12月	ポスター発表
60	分子動力学シミュレーションによる生体高分子の研究: RNAへの展開の現状と可能性	山下雄史(東京大学)	2017年度生命科学系学会合同年次大会 (ConBio2017)	2017年12月	招待講演
61	分子動力学計算を用いた抗原抗体界面に存在する塩橋の安定性への周辺環境の影響の研究	岡島亮, 山下雄史(東京大学)	日本化学会春季年会	2018年3月	ポスター発表
62	高速多極子展開法(FMM)をもちいた荷電系の自由エネルギー計算法	浦野 諒(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 吉井 範行(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田 渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第21回理論化学討論会	2018年5月	口頭発表
63	シクロスポリンAのCHARMM力場の開発	山根努(横浜市立大学), 渡邊裕太(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
64	ファーマコフォア解析によるビタミンD受容体アゴニスト/アンタゴニスト活性調節機構の研究	工藤崇文(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表

65	新規アルケミカル結合自由エネルギー計算手法ワーブドライブ法の開発と有限サイズ効果	浴本亨(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
66	高精度な脂質分子のFUJI力場の開発と多剤排出トランスポーター膜系への適用	篠田恵子(東京大学 先端科学技術研究センター), 藤谷秀章(東京大学 先端科学技術研究センター)	第18回日本蛋白質科学会年会	2018年6月	ポスター発表
67	分子動力学計算を用いた抗原抗体界面に存在する塩橋の安定性を決定する要因の研究	岡島亮, 山下雄史(東京大学)	分子科学討論会	2018年9月	ポスター発表
68	Free energy profiles of the intra- and inter-nucleosomal interactions by all-atom molecular dynamics simulations	Hisashi Ishida(QST), Hidetoshi Kono(QST)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	招待講演
69	Investigating the influence of Argine Dimethylation on Nucleosome Dynamics using All-atom Simulation and Kinetic Analysis	Zhenhai Li(QST), Hidetoshi Kono(QST)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表
70	シクロスポリンAのCHARMM力場の開発	山根 努(横浜市立大学), 渡邊 裕太(横浜市立大学), 浴本 亨(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表

71	ファーマコフォア解析を用いたビタミンD受容体のアゴニスト/アンタゴニスト活性調節機構の研究	工藤 崇文(横浜市立大学), 浴本 亨(横浜市立大学), 池口 満徳(横浜市立大学)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表
72	周期境界条件下の分子動力学シミュレーションを使った結合自由エネルギー計算で生じる有限サイズ効果を抑えるアルケミカル摂動法の開発	浴本 亨(横浜市立大学), 山根 努(横浜市立大学), 池口 満徳(横浜市立大学)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	ポスター発表
73	B型肝炎ウイルスの薬剤の吸収に関する自由エネルギー計算	浦野 諒(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 吉井 範行(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田 渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎 進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表
74	B型肝炎ウイルスの薬剤の吸収に関する自由エネルギー計算	浦野 諒(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 吉井 範行(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田 渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎 進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第12回分子科学討論会	2018年9月	口頭発表
75	Development of a polarized coarse-grained water model and its application in lipid membrane systems	Yusuke Miyazaki(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Susumu Okazaki(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表
76	Molecular dynamics simulations of domain formation in mixed lipid bilayers	Sangjae Seo(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表

77	Quantitative Coarse-Grained Molecular Modeling of Biomembranes	Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表	
78	膜融合過程における脂質組成の影響: 定量的粗視化分子シミュレーション	篠田 渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), Sangjae Seo(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第69回コロイド及び界面化学討論会	2018年9月	口頭発表	
79	Development of the CHARMM force field for Cyclosporine A	山根努(横浜市立大学), 高橋遼(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2018年大会	2018年10月	口頭発表 & ポスター発表	
80	In silico binding affinity analysis for phosphodiesterase-10A inhibitors	湯浅千紗(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2018年大会	2018年10月	ポスター発表	
81	In silico protein-protein interaction analysis of axon guidance molecule semaphorin and receptor plexin	下地恵令奈(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 永友芽里(横浜市立大学), 禾晃和(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2018年大会	2018年10月	ポスター発表	
82	Protein-ligand binding process studied by Markov state model	浴本亨(横浜市立大学), 荒木望嗣(京都大学), 井阪悠太(神戸医療産業都市推進機構), 山根努(横浜市立大学), 奥野恭史(京都大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2018年大会	2018年10月	口頭発表 & ポスター発表	

83	Study of regulation mechanism of agonistic/antagonistic activities of vitamin D receptor ligand-binding domain	工藤崇文(横浜市立大学), 浴本亨(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	情報計算科学生物学会2018年大会	2018年10月	ポスター発表
84	B型肝炎ウイルスの薬剤の吸収に関する自由エネルギー計算	浦野 諒(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 吉井 範行(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田 渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	口頭発表
85	Effect of PEGylated Lipids on Physical Properties of Lipid Membranes Coarse-Grained Molecular Dynamics Study	Takanori Ono(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Susumu Okazaki(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	ポスター発表
86	Free energy evaluation of drug absorption on Hepatitis B virus capsid using all-atom molecular dynamics simulation	Ryo Urano(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Noriyuki Yoshii(Department of Materials Chemistry, Nagoya University), Wataru Shinoda(Department of Materials Chemistry, Nagoya University)	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	ポスター発表
87	PEG修飾脂質が膜物性に与える影響: 粗視化分子シミュレーション	小野貴憲(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 田中裕貴(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	ポスター発表
88	pKa位置依存性を考慮したイオン性薬物膜透過の多次元自由エネルギー解析	田村美侑(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	ポスター発表

89	全原子分動力学計算によるウイルスが電解液中に生成する表面電場と分子間相互作用	岡崎進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	2018年日本表面真空学会学術講演会	2018年11月	招待講演
90	分子動力学法を用いた pregenome RNA を内包したB型肝炎ウイルスの物性解明	山口陽平(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 今井甫, 藤本和士(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 浦野諒(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	ポスター発表
91	極性を持つ粗視化水モデルの開発と生体分子系における応用	宮崎裕介(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 岡崎進(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻), 篠田渉(名古屋大学工学研究科応用物質化学専攻)	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	口頭発表
92	分子動力学シミュレーションを用いたビタミンD受容体リガンド結合ドメインの溶液構造解析	浴本亨(横浜市立大学), 工藤崇文(横浜市立大学), 山根努(横浜市立大学), 池口満徳(横浜市立大学)	第46回構造活性相関シンポジウム	2018年12月	ポスター発表
93	定量的粗視化分子シミュレーションによる脂質膜の安定性と形態・トポロジー変化の分子論	篠田 渉(名古屋大学)	第66回応用物理学会春季学術講演会	2019年3月	招待講演

4. 研究会等

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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	ビタミンD受容体リガンド結合ドメインのMD-SAXS相関構造解析	浴本亨, 池口満徳(横浜市立大学)	ポスト京 重点課題(1) 第一回ワークショップ	2016年9月	口頭発表	
2	抗原抗体系のMD計算と界面構造の解析	山下雄史(東京大学)	2016年度 ポスト「京」重点課題1 第1回ワークショップ	2016年9月	口頭発表	

3	構造多形をもつ生体高分子の全原子モデルの構築	河野秀俊(量研機構)	JSBi関西地域部会 第21回バイオメディカル研究会	2016年9月	招待講演	
4	アセチル化、メチル化によるヒストンH3テールの振る舞いの変化	河野秀俊、Luo Di、池部仁善(量研機構)、櫻庭俊(東大)	第34回染色体ワークショップ・第15回核ダイナミクス研究会	2017年1月	口頭発表	
5	分子動力学シミュレーションによるタンパク質の分子認識の研究: 分子デザインへの挑戦	山下雄史(東京大学)	量子系分子科学セミナー(理化学研究所計算科学研究機構)	2017年10月	招待講演	
6	New lipid force fields to include anisotropic membrane characters	篠田恵子、藤谷秀章(東大先端研)	膜タンパク質研究会	2017年10月	ポスター発表	
7	生体分子のダイナミクスと機能: 分子動力学シミュレーションの非コードRNA研究ツールとしての可能性	山下雄史(東京大学)	一般財団法人バイオインダストリー協会主催「未来へのバイオ技術」勉強会「長鎖非コードRNA研究の進歩と可能性」	2017年11月	招待講演	
8	Theoretical study on molecular dynamics in biomolecular functions	Takefumi Yamashita(the University of Tokyo)	第12回システム生物医学(LSBM)研究会	2018年3月	口頭発表	
9	クロマチンダイナミクスによる遺伝子発現制御	河野秀俊(QST)	量子生命科学研究会第2回学術集会	2018年5月	ポスター発表	
10	分子動力学シミュレーションによる多剤排出トランスポーターAcrBと基質間の反応機構の解明	篠田恵子(東京大学 先端科学技術研究センター)	H29年度 インターン・後期「若手・女性利用者推薦」成果報告会	2018年6月	ポスター発表	
11	ストレプトアビジン変異体ービオチンアナログのMDシミュレーション	篠田恵子(東京大学 先端科学技術研究センター)	2018年度 ポスト「京」重点課題1 第5回ワークショップ	2018年8月	口頭発表	

5. 一般向け講演会

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(講演会名等)	発表した時期	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	理論物理学とスーパーコンピュータによる新しい分子バイオロジーと分子デザイン	山下雄史(東京大学先端研)	東大駒場キャンパス公開2018 生命科学講演会「計測・情報科学をもちいた新しい生命科学の潮流」	2018年6月	講演	
2	創薬標的蛋白質の分子動力学シミュレーション	浴本亨(横浜市立大学)	新潟大学物性理論研究室セミナー	2018年6月	講演	
3	スーパーコンピュータで知るタンパク質、DNAの形と動き	河野 秀俊(量子科学技術研究開発機構)	スパコンを知る集い	2019年3月	招待講演	

6. 新聞/TV/WEB配信/広報誌/雑誌/等のメディア

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(媒体名等)	発表した時期	媒体別	
1	ビタミンD受容体の不活性型と活性阻害型の構造を解明 一創薬ターゲットとなるビタミンD受容体とリガンドとの相互作用機構を原子レベルで明らかに	山本恵子(昭和薬科大学), 清水伸隆(高エネルギー加速器研究機構), 池口満徳(横浜市立大学)	昭和薬科大学・高エネルギー加速器研究機構・横浜市立大学 プレスリリース	2016年9月	Web配信(動画なし)	
2	第11800号 ビタミンD受容体の全構造解明 新手法を組み合わせ初めて成功	山本恵子(昭和薬科大学)	薬事日報 第11800号 2016年11月18日	2016年11月	新聞	

7. 書籍

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(書籍名等)	発表した時期		
1	Chapter 10. Structure of the MotA/B Proton Channel	Akio Kitao(The University of Tokyo), Yasutaka	Humana Press, Methods in Molecular Biology Vol.1593. "The Bacterial Flagellum.	2017年5月		

サブ課題C:創薬ビッグデータ統合システムの開発

サブ課題代表者:奥野 恭史

1. 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	国内・国際的 別	査読(有りの場 合○を記入)	招待講演 (○を記)
1	COMBO: An efficient Bayesian optimization library for materials science	Tsuyoshi Ueno(Department of Computational Biology and Medical Sciences, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, 5-1-5-CB02 Kashiwanoha, Kashiwa 277-8561, Japan), Trevor David Rhone(Department of Physics, Harvard University, 17 Oxford	Materials Discovery, Volume 4, Pages 18–21	2016年6月	英語		
2	CellTree: an R/bioconductor package to infer the hierarchical structure of cell populations from single-cell RNA-seq data	David A. duVerle(University of Tokyo), Sohiya Yotsukura(Kyoto University), Seitaro Nomura(University of Tokyo), Hiroyuki Aburatani(University of Tokyo), Koji Tsuda(University of Tokyo)	BMC Bioinformatics, Vol.17, 363 (2016)	2016年9月	英語		
3	The Effect of Conformational Flexibility on Binding Free Energy Estimation between Kinases and Their Inhibitors	Mitsugu Araki(RIKEN Advanced Institute for Computational Science), Narutoshi Kamiya(Graduate School of Simulation Studies, University of Hyogo), Miwa Sato(Mitsui Knowledge Industry Co., Ltd.), Masahiko Nakatsui(Graduate School of Medicine, Kyoto	Journal of Chemical Information and Modeling, Vol.56, 12, pp2445–2456	2016年12月	英語		
4	Brigatinib combined with anti-EGFR antibody overcomes osimertinib resistance in EGFR-mutated non-small-cell lung cancer	Ken Uchibori(Japanese Foundation for Cancer Research), Naohiko Inase(Tokyo Medical and Dental University), Mitsugu Araki(RIKEN), Mayumi Kamada(Kyoto University), Shigeo Sato(Japanese Foundation for Cancer	Nature Communications, Vol.8, pp.14768 (2017)	2017年3月	英語		
5	Association between UGT1A1*28*28 genotype and lung cancer in the Japanese population	Nishikawa, Y(Kyoto University), Kanai, M(Kyoto University), Narahara, M(Kyoto University, McGill University), Tamon, A(Kyoto University), Brown, J.B.(Kyoto University), Taneishi, K(RIKEN), Nakatsui, M.(Kyoto University), Okamoto, K(Kyoto University Hospital), Uneno,	INTERNATIONAL JOURNAL OF CLINICAL ONCOLOGY, 22-2, 269–273(2017)	2017年4月	英語		

6	Accurate prediction of complex structure and affinity for a flexible protein receptor and its inhibitor	Bekker, G(Osaka University), Kamiya, N(Osaka University, RIKEN, University of Hyogo), Araki, M(RIKEN, Kyoto University), Fukuda, I(Osaka University), Okuno, Y(RIKEN, Kyoto University), Nakamura, H(Osaka	Journal of Chemical Theory and Computation 13(6), 2389–2399, 2017.	2017年6月	英語		
7	CGBVS-DNN: Prediction of Compound-protein Interactions Based on Deep Learning	Hamanaka, M(Kyoto University), Tanaishi, Kei(RIKEN), Iwata, H(Foundation for Biomedical Research and Innovation), Ye, J(Intel Corporation), Pei, J(Intel Corporation), Hou, J(Intel Corporation), Okuno,	Molecular Informatics. 36(1-2), 2017	2017年8月	英語		
8	臨床ビッグデータ解析の展望—実臨床データとゲノム情報への応用	内野詠一郎、中津井雅彦、鎌田真由美、荒木望嗣、奥野恭史(京都大学)、種石 慶(理化学研究所)	日本エム・イー学会誌「生体医工学」55(4):173-182,2017.	2017年8月	日本語		
9	Temperature-Sensitive Substrate and Product Binding Underlie Temperature-Compensated Phosphorylation in the Clock	Yuta Shinohara(Laboratory for Synthetic Biology, RIKEN Quantitative Biology Center), Yohei M. Koyama(Laboratory for Synthetic Biology, RIKEN Quantitative Biology Center), Maki Ukai-	Molecular Cell, Vol.67, pp.783-798.e20 (2017)	2017年9月	英語		
10	創薬におけるAIの可能性	種石 慶(理化学研究所), 岩田浩明、小島諒介、奥野恭史(京都大学)	日本化学会情報化学部会誌、35(3), 212, 2017, 10月号	2017年10月	日本語		
11	構造データと分子シミュレーション技術によるインシリコ創薬支援研究	広川貴次(産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター)	アンサンプル、分子シミュレーション研究会、19 巻 4 号 225 頁～ 229 頁	2017年10月	日本語		

12	ChemTS: an efficient python library for de novo molecular generation	Xiufeng Yang(Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Kashiwa, Japan.), Jinzhe Zhang(Department of Biosciences, INSA Lyon, Villeurbanne Cedex, France.), Kazuki	Science and Technology of Advanced Materials, Vol.18, pp.972-976 (2017)	2017年11月	英語		
13	RNA inverse folding using Monte Carlo tree search	Xiufeng Yang(University of Tokyo), Kazuki Yoshizoe(University of Tokyo), Akito Taneda(Hirosaki University), Koji Tsuda(University of Tokyo)	BMC Bioinformatics, Vol.18, 468 (2017)	2017年11月	英語		
14	Core Binding Site of a Thioflavin-T-Derived Imaging Probe on Amyloid beta Fibrils Predicted by Computational Methods	Ryoko Kawai(Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Kyoto University, 46-29 YoshidaShimoadachi-cho, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan), Mitsugu Araki(Graduate School of	ACS Chemical Neuroscience (2018)	2018年1月	英語		
15	A secondary RET mutation in the activation loop conferring resistance to vandetanib	Takashi Nakaoku(National Cancer Center Research Institute), Takashi Kohno(National Cancer Center Research Institute, National Cancer Center), Mitsugu Araki(RIKEN, Kyoto-University), Seiji	Nature Communications, Vol.9 (2018)	2018年2月	英語		
16	Machine learning accelerates MD-based binding pose prediction between ligands and proteins	Kei Terayama(Department of Computational Biology and Medical Science, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Chiba, Japan), Hiroaki Iwata(Foundation for Biomedical Research and Innovation, Hyogo, Japan), Mitsugu Araki(RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Hyogo,	Bioinformatics, Vol.34, pp.770-778 (2018)	2018年3月	英語		
17	Fine-grained optimization method for crystal structure prediction	Kei Terayama(RIKEN, Kyoto University), Tomoki Yamashita(Osaka University), Tamio Oguchi(Osaka University), Koji Tsuda(University of Tokyo, RIKEN)	npj Computational Materials, Vol.4 (2018)	2018年7月	英語		

18	Hunting for Organic Molecules with Artificial Intelligence: Molecules Optimized for Desired Excitation Energies	Masato Sumita(Center for Advanced Intelligence Project, RIKEN, 1-4-1 Nihombashi, Chuo-ku, Tokyo 103-0027, Japan; International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan), Xiufeng Yang(Center for Advanced	ACS Central Science, Vol.4, pp.1126-1133 (2018)	2018年8月	英語		
19	Fibronectin type III domain-containing protein 5 interacts with APP and decreases amyloid production in Alzheimer's disease	Yasuha Noda(Department of Human Health Sciences, Graduated School of Medicine, Kyoto University), Akira Kuzuya(Department of Neurology, Graduated School of Medicine, Kyoto University), Kyosuke	Molecular Brain (2018) 11:61	2018年10月	英語		
20	Population-based De Novo Molecule Generation, Using Grammatical Evolution	Naruki Yoshikawa(Department of Computational Biology and Medical Sciences, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, 5-1-5 Kashiwa-no-ha, Kashiwa, Chiba 277-8561,	Chemistry Letters, Vol.47, pp.1431-1434 (2018)	2018年11月	英語		
21	Improving the Accuracy of Protein-Ligand Binding Mode Prediction Using a Molecular Dynamics-Based Pocket Generation Approach	Mitsugu Araki(Graduate School of Medicine, Kyoto University, 53 Shogoin-Kawaharacho, Sakyo-ku Kyoto 606-8507 Japan; RIKEN Advanced Institute for Computational Sciences, 7-1-26 Minatojima-Minamimachi, Chuo-ku Kobe Hyogo 650-0047 Japan), Hiroaki Iwata(Graduate School of Medicine, Kyoto University, 53 Shogoin-Kawaharacho, Sakyo-ku Kyoto 606-8507 Japan; Research and Development Group	Journal of Computational Chemistry, Vol.39, pp.2679-2689 (2018)	2018年12月	英語		
22	Ligand binding to human prostaglandin E receptor EP4 at the lipid-bilayer interface	Frostuki Toyokuni(Kyoto University Graduate School of Medicine), Kazushi Morimoto(Kyoto University Graduate School of Medicine), Ryoji Suno(Kyoto University Graduate School of Medicine), Shoichiro Horita(Kyoto University Graduate School of Medicine), Keitaro Yamashita(RIKEN SPring-8 Center), Kunio Hirata(RIKEN SPring-8 Center), Yusuke Sekiguchi(Kyoto University Graduate School of Medicine), Satoshi	Nature Chemical Biology, Vol.15, pp.18-26 (2018)	2018年12月	英語		
23	Dynamic Docking of a Medium-Sized Molecule to Its Receptor by Multicanonical MD Simulations	Yusuke Sekiguchi(Kyoto University Graduate School of Medicine), Satoshi Morimoto(Kyoto University Graduate School of Medicine), Ryoji Suno(Kyoto University Graduate School of Medicine), Shoichiro Horita(Kyoto University Graduate School of Medicine), Keitaro Yamashita(RIKEN SPring-8 Center), Kunio Hirata(RIKEN SPring-8 Center), Yusuke Sekiguchi(Kyoto University Graduate School of Medicine), Satoshi	The Journal of Physical Chemistry B, Vol.123, pp.2479-2490 (2019)	2019年3月	英語		

24	Prediction of ALK mutations mediating ALK-TKIs resistance and drug re-purposing to overcome the resistance	Koutarou Okada(Japanese Foundation for Cancer Research, Graduate School of Frontier Science, The University of Tokyo), Mitsugu Araki(RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Graduate School of Medicine, Kyoto University), Takuya Sakashita(Japanese Foundation for Cancer Research), Biao Ma(Research and Development Group for In Silico Drug Discovery, Pro-Cluster-Kobe, FBRI), Ryo Kanada(RIKEN)	EBioMedicine, Vol.41, pp.105-119 (2019)	2019年3月	英語		
25	Stratifin Inhibits SCFFB7 Formation and Blocks Ubiquitination of Oncoproteins during the Course of Lung Adenocarcinogenesis	Rya Arima(University of Tsukuba), Jeongmin Hong(University of Tsukuba), Takatsugu Hirokawa(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, National Institutes of Advanced Industrial Science and Technology), Yunjung Kim(University of Tsukuba), Tomoki Nakagawa(University of Tsukuba), Shingo Sakashita(University of Tsukuba), Noriaki Sakamoto(University of Tsukuba), Yukinori Kozuma(Kumamoto Health Science University)	Clinical Cancer Research (2019)	2019年3月	英語		
26	Structural insights into the differences among lactisole derivatives in inhibitory mechanisms against the human sweet taste receptor	Tomoya Nakagita(The University of Tokyo), Akiko Ishida(The University of Tokyo), Takumi Matsuya(The University of Tokyo), Takuya Kobayashi(Kyoto University), Masataka Narukawa(The	PLOS ONE, Vol.14, pp.e0213552 (2019)	2019年3月	英語		
27	ビッグデータ創薬	奥野恭史(理化学研究所, 京都大学大学院医学研究科)	最新医学 74(3), 62-66, 2019.	2019年3月	日本語		

2. 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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	Prediction of compound-protein interactions based on deep-layered learning	Masatoshi Hamanaka(Kyoto university), Kei Taneishi(RIKEN), J.B. Brown(Kyoto university), Yasushi Okuno(Kyoto university)	Pacificchem 2015 “Chemical Networking: Building Bridges Across the Pacific” (Pacificchem)	2015年12月	口頭発表	
2	Insight into a rapid heme transfer reaction between near transporter domains of Staphylococcus aureus: a theoretical study using QM/MM and MD simulations	Yoshitaka Moriwaki(The University of Tokyo), Tohru Terada(The University of Tokyo), Kouhei Tsumoto(The University of Tokyo), Kentaro Shimizu(The University of Tokyo)	Biophysical Society 60th Annual Meeting	2016年3月	ポスター発表	

3	Prediction of Compound-Protein Interactions Based on Deep Learning Technique	浜中雅俊(京都大学大学院), 奥野恭史(京都大学大学院)	CREST国際シンポジウム ビッグデータ応用 国際シンポジウム “Advanced Application Technologies to Boost Big Data Utilization for Multiple-Field Scientific Discovery and Social Problem Solving (Big Data Application)” (国立研究開発法人 科学技 術振興機構 主催)	2016年3月	口頭発表	
4	Validation of the Set of Six Adaptable Prognosis Prediction (SAP) Models for Cancer Patients in Palliative Care Settings : A sub analysis of the Japan-Prognostic assessment tools Validation (J-ProVal) study	Kei Taneishi(RIKEN), Masahiko Nakatui(Kyoto University), Yasushi Okuno(Kyoto University)	ESMO Asia 2016 Congress Singapore (ESMO 主催)	2016年12月	口頭発表	
5	Ligand binding site analysis with protein flexibility for ligand docking, lead optimization and virtual screening	Takatsugu Hirokawa(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)	International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2017	2017年4月	口頭発表	
6	Prediction of complex structure and affinity of CDK2 and its inhibitor using McMD and TI simulations	G.J.Bekker(Kyoto University), N.Kamiya(University of Hyogo), M. Araki(Kyoto University), I. Fukuda(Osaka University), Y. Okuno(Kyoto University),H. Nakamura(Osaka University)	The joint 19th International Union of Pure and Applied Biophysics (IUPAB) and 11th European Biophysical Societies' Association (EBSA) Congress	2017年7月	ポスター発表	
7	Construction of Knowledge-base for Clinical Interpretation of Genomic Variants	Kamada M(Kyoto University), Katayama T(DBCLS), Kawashima S(DBCLS), Kojima R(Kyoto University), Nakatsui M(Kyoto University), Okuno Y(Kyoto University)	10th International SWAT4HCLS Conference	2017年12月	ポスター発表	
8	Application of Deep Learning to Drug Discovery	Hiroaki Iwata, Yasushi Okuno(Kyoto University)	Crest International Symposium on Big Data Application	2018年1月	招待講演	

9	Comparing ensembles of protein structures from molecular dynamics simulations in terms of residue-residue interaction	Chie Motono(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, Advanced Industrial Science and Technology), Takatsugu Hirokawa(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, Advanced	The Asia Pacific Bioinformatics Conference (APBC) 2018	2018年1月	ポスター発表	
10	Molecular mechanism of resistance to kinase inhibitors clarified by a binding free energy computation method and its improvement by incorporating protein flexibility	Araki M, Okuno Y(Kyoto University)	Biophysical Society 62nd annual meeting	2018年2月	ポスター発表	
11	Conformational Transition Dynamics of a Potassium Channel Voltage Sensor Domain	Tohru Terada(The University of Tokyo)	Biophysical Society 62nd Annual Meeting	2018年2月	ポスター発表	
12	Development of in silico Drug Design Suite Combined with HPCs	Ma Biao, Isaka Yuta(IBRI), Araki Mitsugu, Iwata Hiroaki, Okuno Yasushi(Kyoto University)	Life Science Association of Chinese in Japan (LSACJ conference (2018))	2018年10月	口頭発表	
13	Development of in silico Drug Design Suite Combined with HPCs”, Life Science Association of Chinese in Japan	Ma, B(FBRI), Isaka, Y(FBRI), Araki,M, Iwata, H(Kyoto University), Okuno, Y(RIKEN, kyoto University)	LSACJ conference (2018)	2018年10月	口頭発表	
14	Drug Resistance Induced by Local and Allosteric Conformational Changes in Oncogenic Tyrosine Kinases	Araki, M.(Kyoto University), Okuno, Y(RIKEN, Kyoto University)	Biophysical Society 63rd annual meeting	2019年3月	ポスター発表	

15	Drug resistance acquired by local and allosteric conformational changes in oncogenic tyrosine kinases	Araki, M(Kyoto University), Okuno, Y(RIKEN, Kyoto University)	Spring 2019 ACS National Meeting	2019年3月	ポスター発表	
----	---	---	----------------------------------	---------	--------	--

3. 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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	M-path Database: Navigating Potential Metabolic Pathways	小川哲平(東海大学), 牧口大旭(三井情報株式会社), 中津井雅彦(京都大学大学院), Cox III, R(神戸大学), 近藤昭彦(神戸大学), 荒木通啓(神戸大学)	生命医薬情報学連合大会2015年大会 生命情報ビッグデータ時代のバイオインフォマティクスの挑戦～環境から医療まで～(日本バイオインフォマティクス学会、日本オミックス医療学会、情報計算化学生物学会 主催)	2015年10月	ポスター発表	
2	Prediction of cancer drug efficiency by combining clinical genetics and molecular dynamics	鎌田真由美(京都大学大学院), 中津井雅彦(京都大学大学院), 荒木望嗣(理化学研究所), 奥野恭史(京都大学大学院)	生命医薬情報学連合大会2015年大会 生命情報ビッグデータ時代のバイオインフォマティクスの挑戦～環境から医療まで～(日本バイオインフォマティクス学会、日本オミックス医療学会、情報計算化学生物学会 主催)	2015年10月	ポスター発表	
3	Protein-ligand binding pathways revealed by coarse-grained molecular dynamics simulations	Tatsuki Negami(The University of Tokyo), Kentaro Shimizu(The University of Tokyo), Tohru Terada(The University of Tokyo)	CBI学会2015年大会	2015年10月	ポスター発表	
4	“がん治療医のためのバイオインフォマティクス実践講座”「がん研究者のための、本当にわかるがんゲノム解析実践講座」	奥野恭史(京都大学大学院), 鎌田真由美(京都大学大学院), 松村謙臣(京都大学大学院), 村上隆介(京都大学大学院)	第53回日本癌治療学会教育シンポジウム講演(日本癌治療学会 主催)	2015年10月	招待講演	
5	「ディープラーニングを用いたビッグデータ創薬」	浜中雅俊(京都大学大学院)	生命医薬情報学連合大会2015 生命情報ビッグデータ時代のバイオインフォマティクスの挑戦～環境から医療まで～(日本バイオインフォマティクス学会、日本オミックス医療学会、情報計算化学生物学会 主催)	2015年10月	口頭発表	

6	「ポスト「京」によるスパコン創薬の未来」	奥野恭史(京都大学大学院)	生命医薬情報学連合大会2015 生命情報ビッグデータ時代のバイオインフォマティクスの挑戦～環境から医療まで～(日本バイオインフォマティクス学会、日本オミックス医療学会、情報計算化学生物学会 主催)	2015年10月	招待講演	
7	「京大発ベンチャーから生まれたスパコン創薬コンソーシアム」	奥野恭史(京都大学大学院)	CBI学会2015年大会 創薬のオープンイノベーションー新領域と in silico の接点ーiPS創薬・アカデミア創薬・ビッグデータ(CBI学会主催)	2015年10月	招待講演	
8	データ主導型の予測医療と精密医療	奥野恭史(京都大学大学院)	日本人類遺伝学会 第60回大会(日本人類遺伝学会 主催)	2015年10月	招待講演	
9	粗視化分子動力学シミュレーションで探るタンパク質・リガンド結合過程	寺田 透(東京大学)	CBI学会2015年大会	2015年10月	招待講演	
10	計算機科学と結晶解析との融合に向けて	奥野恭史(京都大学大学院)	平成27年度結晶学会年会及び総会(日本結晶学会 主催)	2015年10月	招待講演	
11	創薬分野における機械学習応用と情報科学への期待	奥野恭史(京都大学大学院)	第18回情報論的学習理論ワークショップ IBIS2015(電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究専門委員会 主催)	2015年11月	招待講演	

12	ドラッグデザインする人工知能	奥野恭史(京都大学大学院)	「オミックス創薬シンポジウム」AI創薬 ～ 人工知能(AI)を用いてビッグデータから創薬を目指す ～(日本オミックス医療学会 主催)	2015年12月	招待講演	
13	ポスト「京」による次世代計算創薬の展望	奥野恭史(京都大学大学院)	第38回日本分子生物学会年会・第88回日本生化学会大会合同大会BMB2015(日本分子生物学会、日本生化学会 主催)	2015年12月	招待講演	
14	「ポスト「京」が拓く創薬計算の未来」	奥野恭史(京都大学大学院)	第368回CBI学会研究講演会「「京」からポスト「京」へー革新的創薬基盤の構築に向けた取り組み」(情報計算化学生物学会(CBI学会)東北メディカル・メガバンク機構、東京医科歯科大学 主催)	2016年1月	招待講演	
15	「ビッグデータからの予測医療と精密医療」	奥野恭史(京都大学大学院)	第358回川崎医学会講演会(川崎医科大学川崎医学会講演会事務局 主催)	2016年2月	招待講演	
16	ビッグデータ時代の創薬	奥野恭史(京都大学大学院)	第89回日本薬理学会年会企画シンポジウム【7】「計算科学的アプローチによる薬理学研究の新展開」"New paradigms for in silico approaches in Pharmacological Research"	2016年3月	招待講演	
17	分子シミュレーションで探るタンパク質-リガンド間相互作用	寺田 透(東京大学), 森脇由隆(東京大学), 根上 樹(東京大学), 吉野 龍ノ介(東京大学), 清水 謙多郎(東京大学)	日本農芸化学会2016年度大会	2016年3月	招待講演	

18	臨床から基礎へのReverse Translational Research ~in silico研究の視点から	奥野恭史(京都大学大学院)	日本薬学会第136年会「次世代の薬学への羅針盤 ~新しい薬学への出帆~」	2016年3月	招待講演
19	ビッグデータからの予測医療と個別化医療	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	ヘルスケアIT 2016 UBMジャパン株式会社 主催	2016年4月	招待講演
20	Precision Medicineを目指した医療ビッグデータ解析とシミュレーション創薬	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	関西健康・医療創生会議 シンポジウム「医療と健康に貢献する人工知能」	2016年5月	招待講演
21	Flexible docking simulation between cyclin-dependent kinase 2 and its inhibitor using multicanonical MD method	Narutoshi Kamiya(Kyoto University), G.J.Bekker(RIKEN), Mitugu Araki(RIKEN), Okuno Yasushi(Kyoto University)	第16回日本蛋白質科学会年会 日本蛋白質科学会 主催	2016年6月	ポスター発表
22	スーパーコンピュータが拓く創薬イノベーション Drug discovery innovation from the supercomputer	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	JASIS 2016「ライフサイエンス イノベーションゾーン」(一般社団法人 日本分析機器工業会・一般社団法人 日本科学機器協会 主催)	2016年9月	基調講演
23	創薬分析科学とオミクス解析 ~スーパーコンピュータが拓く創薬計算の未来~	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第29回バイオメディカル分析科学シンポジウム(BMAS2016)(日本薬学会物理系薬学部会 主催)	2016年9月	招待講演

24	Exploration of Protein-Ligand Complex Configuration in The Equilibrium State	佐藤美和(三井情報株式会社), 波内良樹(理化学研究所), 荒木望嗣(京都大学)	CBI学会2016年大会	2016年10月	招待講演
25	in silico 創薬の将来 生体分子シミュレーション、構造生物学、ビッグデータの連携からアカデミア創薬へ	北島 哲郎(ISP(システム計画研究所)), 種石 慶(理化学研究所), 岩田浩明(京都大学), 上島 仁(ISP(システム計画研究所)), 山本 真司(ISP(システム計画研究所)), 稲荷 和典(ISP(システム計画研究所)), 奥野恭史(京都)	CBI学会2016年大会	2016年10月	招待講演
26	「Application of deep learning for large scale data with standard performance workstation(s)」	種石慶(理化学研究所・計算科学研究機構、先端医療振興財団), 岩田浩明(京都大学大学院 医学研究科), 奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	CBI学会2016年大会「in silico 創薬の将来 生体分子シミュレーション、構造生物学、ビッグデータの連携からアカデミア創薬へ」(情報計算法学生物学会 主催)	2016年10月	口頭発表
27	「生体分子シミュレーションの実用化への道」「スパコン創薬の実用化を目指して」	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	CBI学会2016年大会「in silico 創薬の将来 生体分子シミュレーション、構造生物学、ビッグデータの連携からアカデミア創薬へ」(情報計算法学生物学会 主催)	2016年10月	招待講演
28	スパコン創薬の実用化を目指して	奥野恭史(京都大学/理化学研究所)	CBI学会2016年大会	2016年10月	招待講演
29	ポスト京が拓く創薬計算の未来	奥野恭史(理化学研究所)	ATI2016年度第1回バイオ単分子研究会	2016年10月	招待講演

30	創薬 Deep Learning ワークロードの最適化	種石 慶(理化学研究所・計算科学研究機構、先端医療振興財団)	CBI学会2016年大会「in silico 創薬の将来 生体分子シミュレーション、構造生物学、ビッグデータの連携からアカデミア創薬へ」(情報計算化学生物学会 主催)	2016年10月	招待講演	
31	創薬動態を躍進させる関連異分野・融合領域のin silico技術「ビッグデータ・スパコン時代の医療と創薬」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日本薬物動態学会第31回年会「薬物動態研究が切り拓く創薬と薬物治療の新機軸」(日本薬物動態学会 株式会社メディセオ 主催)	2016年10月	招待講演	
32	Coarse-grained simulations of protein-ligand binding: effect of mutations near the ligand-binding pathways	Tatsuki Negami(The University of Tokyo), Tohru Terada(The University of Tokyo), Kentaro Shimizu(The University of Tokyo)	第54回日本生物物理学会年会	2016年11月	ポスター発表	
33	キナーゼとATP競争阻害剤との結合自由エネルギー計算における、薬剤結合サイトの立体構造柔軟性がもたらす影響	荒木望嗣(京都大学), 神谷成敏(兵庫県立大学), 佐藤美和(三井情報株式会社), 中津井雅彦(京都大学), 広川貴次(産業技術総合研究所), 奥野恭史(京都大学)	第54回日本生物物理学会大会	2016年11月	招待講演	
34	スパコン・ビッグデータが拓くIT創薬の未来	奥野恭史(京都大学)	ImPACT未来開拓研究会2016	2016年11月	招待講演	
35	分子シミュレーションで探るタンパク質-リガンド間相互作用	寺田 透(東京大学), 森脇由隆(東京大学), 根上 樹(東京大学), 清水 謙多郎(東京大学)	第44回構造活性相関シンポジウム 第31回農薬デザイン研究会	2016年11月	招待講演	

36	計算科学・情報科学が拓く創薬の未来	奥野恭史(京都大学)	第30回分子シミュレーション討論会	2016年12月	招待講演	
37	「スパコン・ビッグデータ時代の創薬」	奥野泰史(京都大学大学院)	日本学術会議 薬学委員会 生物系薬学分科会 シンポジウム「ITと創薬の融合～ビッグデータとスーパーコンピューティングで生命現象を解く～」(日本学術会議 薬学委員会 生物系薬学分科会、化学・物理系薬学分科会、日本薬学会 主催)	2017年1月	招待講演	
38	スパコン・ビッグデータ時代の創薬	奥野恭史(京都大学)	日本学術会議 薬学委員会 生物系薬学分科会 シンポジウム	2017年1月	招待講演	
39	スーパーコンピュータ・人工知能が拓く創薬と医療の未来	奥野恭史(京都大学)	第17回京都コムズ会員セミナー	2017年1月	招待講演	
40	ビッグデータ解析研究最前線	奥野恭史(京都大学)	弘前大学COIヘルシーエイジング・イノベーションサミット2017	2017年1月	招待講演	
41	ビッグデータ・スパコンが拓く医療・創薬の未来	奥野恭史(京都大学)	第9回BKCバイオインフォマティクス研究会 立命館大学	2017年2月	招待講演	

42	医療ビッグデータサイエンティスト養成プログラムについて	奥野恭史(京都大学大学院)	高度医療専門職大学院シンポジウム「人間健康科学科の未来像を語る」(京都大学大学院 医学研究科人間健康科学系専攻 主催)2017.2.1	2017年2月	招待講演	
43	医療・創薬におけるビッグデータの可能性	奥野恭史(京都大学)	メディカル ジャパン 第3回日本医療総合展 大阪 第2回ITソリューション展	2017年2月	招待講演	
44	創薬・医療応用を目指す産学連携AIコンソーシアム	奥野恭史(京都大学)	第382回CBI学会講演会「人工知能と創薬－創薬現場で備えておくべきこと－」(情報計算化学生物学会(CBI学会)主催)(2017.3.2)	2017年3月	招待講演	
45	スーパーコンピュータ・人工知能が拓く創薬の未来	奥野恭史(京都大学)	高分子学会17-1ポリマーフロンティア21(公益社団法人 高分子学会 主催)	2017年4月	招待講演	
46	保健医療分野におけるAI活用の意義と可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	原総合知的通信システム基金主催特別セミナー「保健医療分野におけるAI活用の意義と可能性」(公益財団法人原総合知的通信システム基金 主催)	2017年5月	招待講演	
47	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学)	原総合知的通信システム基金主催特別セミナー	2017年5月	招待講演	

48	スーパーコンピュータ・人工知能で挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学)	第17回遺伝子デリバリー研究会シンポジウム	2017年5月	招待講演	
49	スパコン・AIで挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第30回インターフェックスジャパン2017 (リードエグジビション ジャパン株式会社 主催)	2017年6月	招待講演	
50	スーパーコンピュータ・人工知能で挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学)	第116回日本皮膚科学会総会	2017年6月	招待講演	
51	ビッグデータ・人工知能が拓く医療の未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	日本がんと炎症・代謝研究会 第4回学術総会・講演会	2017年6月	招待講演	
52	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第15回日本臨床腫瘍学会学術集会	2017年7月	招待講演	
53	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学)	第15回日本臨床腫瘍学会学術集会	2017年7月	招待講演	

54	スーパーコンピュータ・人工知能が拓く創薬と医療の未来	奥野恭史(京都大学)	第33回創薬セミナー(公益社団法人 日本薬学会 創薬セミナー委員会 主催)	2017年7月	招待講演	
55	ビッグデータの活用による医療の未来	奥野恭史(京都大学)	3.関西再生医療産業コンソーシアム 第3回 KRICフォーラム『オープンイノベーションが拓く再生医療の実用化』(近畿経済産業局 関西再生医療産業コンソーシアム(KRIC) 主催)	2017年7月	招待講演	
56	人工知能が拓く創薬の未来	奥野恭史(京都大学)	“未来へのバイオ技術”勉強会(一般財団法人 バイオインダストリー協会 主催)	2017年7月	招待講演	
57	医療・創薬におけるビッグデータの可能性	奥野恭史(京都大学)	第18回 薬制研究会	2017年7月	招待講演	
58	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	京都バイオ計測センターシンポジウム(京都市、地方独立行政法人 京都市産業技術研究所 主催)	2017年8月	招待講演	
59	臨床ゲノム情報のデータベース基盤とAI活用の展望	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第23回日本家族性腫瘍学学術集会	2017年8月	招待講演	

60	Conformational difference in drug efficiency on EGFR mutations based on protein structural analysis	F. Ono(Kyoto University), S. Kohsaka(University of Tokyo), R. Kanada(RIKEN), B. Ma(FBRI), M. Kamada(Kyoto University), M. Araki(RIKEN, Kyoto University), H. Mano(University of Tokyo),	第6回生命医薬情報連合大会2017年大会	2017年9月	ポスター発表
61	XFELテンプレートマッチング法と粗視化法を用いたクロマチン多重立体配座解析の実現可能性に関する研究	徳久淳師、金田 亮、千葉峻太郎(理化学研究所)、井阪悠太、馬 彪(先端医療振興財団)、奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表
62	創薬ビッグデータ統合システムの開発とゲノム医療への応用	荒木望嗣、奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	日本生物物理学会第55回年会	2017年9月	ポスター発表
63	Acceleration of MD-based Binding-Pose Prediction with Ligands and Proteins by Machine Learning	Kei Terayama(The University of Tokyo), Hiroaki Iwata(Found. for Biomedical Research and Innovation), Mitsugu Araki(Kyoto University, AICS RIKEN), Yasushi Okuno(Kyoto University, AICS RIKEN),	The 55th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan	2017年9月	招待講演
64	hERGイオンチャネルと薬剤分子の相互作用予測手法の開発	根上 樹(東京大学大学院農学生命科学研究科)、寺田透(東京大学大学院農学生命科学研究科)	第55回日本生物物理学会年会	2017年9月	ポスター発表
65	Comparing two molecular dynamics simulation trajectories in terms of residue-residue interaction	Chie Motono(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, Advanced Industrial Science and Technology), Takatsugu Hirokawa(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, Advanced	CBI 学会2017年大会	2017年10月	口頭発表 & ポスター発表

66	Ligand binding site analysis with protein flexibility for fragment to lead optimization	Masaaki Itoh(Ube Industries, Inc.), Takatsugu Hirokawa(Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery, Advanced Industrial Science and Technology)	CBI学会年会2017	2017年10月	ポスター発表	
67	MDとQMの融合から創薬へ(KBDDの歩み)	荒木望嗣(京都大学)	CBI学会2017年大会	2017年10月	ポスター発表	
68	ライフサイエンス分野におけるビッグデータ・AI戦略	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	旭化成ファーマ講演会	2017年10月	招待講演	
69	がんゲノム医療における人工知能(AI)の応用	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第27回日本医療薬学会年会	2017年11月	招待講演	
70	スパコン・ビッグデータ時代の創薬	奥野恭史(京都大学)	第44回構造活性相関シンポジウム・第31回農薬デザイン研究会(日本薬学会構造活性相関部会・日本農薬学会農薬デザイン研究会 主催)	2017年11月	招待講演	
71	ライフサイエンスにおけるAIの現状と展望	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	日本農芸化学会産学官若手交流会セミナー	2017年12月	招待講演	

72	産学連携コンソーシアム LINCで挑むAI創薬	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	CBI学会関西講演会	2017年12月	招待講演
73	ゲノム・データベースと医療応用	奥野恭史(京都大学)	Medical Genomics Japan Variant Database (MGeND)の公開と展望. 平成29年度「ゲノム医療の実装に資する臨床ゲノム情報統合データベースの整備とわが国の継続的なゲノム医療実施体制の構築」研究班シンポジウム	2018年1月	招待講演
74	レジデンスを考慮した構造情報と情報科学アプローチによる構造機能相関解析	広川貴次(産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター)	日本薬学会 第138回年会	2018年3月	口頭発表
75	次世代創薬計算技術の開発とゲノム医療への応用	荒木望嗣(京都大学)	Cyber HPC Symposium2018	2018年3月	ポスター発表
76	脂質リガンドのGPCRへの結合機構の解明のための膜誘導体合成と計算科学の融合研究	佐山美沙(東京大学薬学部), 井上飛鳥(東京大学薬学部), 青木淳賢(東北大学薬学部), 広川 貴次(産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター), 関嶋政和(東京工業大学スマート創薬ユニット), 尾谷優子(東京	日本薬学会 第138回年会	2018年3月	口頭発表
77	ゲノム医療にみるAIの現状と可能性	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第106回日本泌尿器科学会総会	2018年4月	招待講演

78	ビッグデータ・AIが拓く医療・創薬の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第22回日本心血管内分泌代謝学会	2018年4月	招待講演	
79	医療・製薬などライフサイエンス分野へのAIの活用	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	ヘルスケアIT 2018	2018年4月	招待講演	
80	AI・ビッグデータの活用で広がる医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	メディカル・デバイス産業振興協議会	2018年5月	招待講演	
81	臨床ゲノム情報統合データベース “MGeND” Medical Genomics Japan Variant Database (MGeND)	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第59回日本神経学会学術集会	2018年5月	招待講演	
82	AIが拓く創薬のイノベーション	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第55回薬剤学懇談会研究討論会	2018年6月	招待講演	
83	LINCの成果活用に向けて	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	LINC成果活用のための講演会	2018年7月	招待講演	

84	Ligand binding site analysis with protein flexibility for drug design	Takatsugu Hirokawa(National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表	
85	単粒子コヒーレント回折パターンを用いた粗視化分子モデリングのためのテンプレートマッチング法	Tokuhisa Atsushi, Kanada Ryo, Chiba Suntaro, Matsumoto Shigeyuki(RIKEN), Isaka Yuta, Ma Biao(IBRI), Kamiya Naruhito(University of Hyogo), Terayama Kei, Okuno Yasushi(kyoto)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表	
86	Analysis of the dynamics of protein conformational change using Markov state model	Tohru Terada(The University of Tokyo), Tatsuki Negami(The University of Tokyo)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	招待講演	
87	Prediction of hERG-drug binding affinities by free energy calculation	Tatsuki Negami(The University of Tokyo), Tohru Terada(The University of Tokyo)	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	口頭発表	
88	AIが引き起こす創薬革命	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第8回CSJ化学フェスタ2018	2018年10月	招待講演	
89	AI創薬の現状と未来 (Today and Future of AI-based Drug Discovery)	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	日本レチノイド研究会第29回学術集会	2018年10月	招待講演	

90	ゲノム医療にみるAIの現状と可能性	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第56回日本癌治療学会学術集会	2018年10月	招待講演	
91	ヘルスケア分野におけるAI・ビッグデータの可能性	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	健康科学ビジネス推進機構講演会	2018年10月	招待講演	
92	ビッグデータ・人工知能が拓く医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	北海道国民健康保険団体連合会講演会	2018年11月	招待講演	
93	分子シミュレーションによる 薬剤開発	広川貴次(産業技術総合研 究所)	日本防菌防黴学会第45回年次大会	2018年11月	招待講演	
94	創薬化学にみるAIの現状と可能性	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科、理化学研究所 科技ハブ産連本部)	第2回化学MOP講演会	2018年11月	招待講演	
95	動径分布関数・エネルギー分布関数をもとにした進化戦略による 力場パラメータ決定手法	千葉峻太郎、池口満徳、奥 野恭史(理化学研究所)	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	ポスター発表	

96	証明数探索を用いた化合物合成経路列挙アルゴリズム	洪川亮祐(東京大学), 石田祥一(京都大学大学院), 美添一樹(理化学研究所), 津田宏治(東京大学, 理化学研究所, NIMS), 寺山慧, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科, 理化学研究所)	第21回情報論的学習理論ワークショップ	2018年11月	口頭発表	
97	AI創薬の現状と未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日本メディカルAI学会第1回学術集会	2019年1月	招待講演	
98	ビッグデータ・AIが拓く医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	第53回日本成人病(生活習慣病)学会学術集会	2019年1月	招待講演	
99	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	フォーMIT 2019	2019年3月	招待講演	
100	分子シミュレーションによる分子レジデンス解析	広川貴次(産業技術総合研究所)	日本化学会第99春季年会	2019年3月	招待講演	

4. 研究会等

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	口頭・ポスター発表の別	招待講演(○を記入)
1	「分子動力学シミュレーションを使用した創薬分野での応用研究事例」	荒木望嗣(理化学研究所)	近畿化学協会コンピュータ化学部会 公開講演会(第94回例会)スーパーコンピュータが拓く新しい創薬研究—スパコン創薬の現状と未来—(近畿化学協会コンピュータ化学部会 主催)	2015年10月	招待講演	

2	「新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築」プロジェクトの取り組み	荒木望嗣(理化学研究所)	第38回ケモインフォマティクス討論会(日本化学会情報化学部会 主催)	2015年10月	招待講演
3	「次世代スパコン・ポスト「京」が拓くコンピュータ創薬の展望」	奥野恭史(京都大学大学院)	近畿化学協会コンピュータ化学部会 公開講演会(第94回例会)スーパーコンピュータが拓く新しい創薬研究—スパコン創薬の現状と未来—(近畿化学協会コンピュータ化学部会 主催)	2015年10月	招待講演
4	ディープラーニングに基づく化合物とタンパク質の相互作用予測	浜中雅俊(京都大学大学院), 種石慶(理化学研究所), 岩田浩明(先端医療振興財団), 奥野恭史(京都大学大学院)	第38回ケモインフォマティクス討論会(日本化学会情報化学部会 主催)	2015年10月	口頭発表
5	ライブビッグデータの医療・創薬応用	奥野恭史(京都大学大学院)	「医療健康分野のビッグデータ活用・研究会」第二回エキスパート勉強会(日本製薬工業協会 医薬産業政策研究所 主催)	2015年10月	招待講演
6	Big data and simulation approaches for drug discovery	奥野恭史(京都大学大学院)	ケモインフォマティクス秋の学校(東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻船津研究室 主催)	2015年11月	招待講演
7	「ビッグデータからの予測医療と個別化医療の可能性」	奥野恭史(京都大学大学院)	第207回 関西眼科先進医療研究会(大阪大学医学部眼科学教室 主催)	2015年11月	招待講演

8	スパコン・ビッグデータ時代の創薬と医療	奥野恭史(京都大学大学院)	科研製薬株式会社 社内講演会	2015年12月	招待講演
9	スーパーコンピュータ「京」から観えてきた計算創薬の現状と未来	奥野恭史(京都大学大学院)	マルホ株式会社 社内講演会	2016年1月	招待講演
10	スーパーコンピュータ「京」から観えてきた計算創薬の現状と未来	奥野泰史(京都大学大学院)	千寿製薬株式会社 社内講演会	2016年1月	招待講演
11	ライブビッグデータの医療健康分野応用研究の最前線	奥野恭史(京都大学大学院)	弘前大大学院医科研究科COI特別講演会 「認知症・生活習慣病研究とビッグデータ解析の融合による画期的な疾患予兆発見の 仕組み構築と予防法の開発」(COI拠点研究 推進機構 主催)	2016年1月	招待講演
12	スパコン・ビッグデータ時代の創薬と医療	奥野恭史(京都大学大学院)	アスピオファーマ株式会社 社内講演会	2016年2月	招待講演
13	スーパーコンピュータ「京」から観えてきた計算創薬の現状と未来	奥野恭史(京都大学大学院)	杏林製薬株式会社 社内講演会	2016年2月	招待講演

14	Prediction of Compound-Protein Interactions based on Deep Learning	浜中雅俊(京都大学大学院), 種石慶(理化学研究所), 岩田浩明(先端医療振興財団), 奥野恭史(京都大学大学院)	第6回日仏ワークショップ(京都大学, Foundation for Biomedical Research and Innovation 主催)	2016年3月	口頭発表	
15	スーパーコンピュータ「京」から観えてきた計算創薬の現状と未来	奥野恭史(京都大学大学院)	富士フイルム株式会社 社内講演会	2016年3月	招待講演	
16	KBDDの概要と今後の展開	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	バイオグリッド研究会2016 ～実用化に向けて動き出したスパコン創薬新時代～	2016年5月	招待講演	
17	スパコン・ビッグデータ時代の創薬	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	フォーラム富山「創薬」第43回研究会「情報科学・計算科学・数理科学から創薬への新展開」～ウェット研究とドライ研究のコラボレーション～	2016年5月	招待講演	
18	スーパーコンピュータが拓く計算創薬の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第29期CMMフォーラム 本例会「コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会」(一般社団法人 企業研究会 主催)	2016年6月	招待講演	
19	スーパーコンピュータを使った創薬ビッグデータの解析	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	インシリコ創薬セミナー「インシリコ創薬活用のポイントと運用ノウハウ」((株)技術情報協会 医薬グループ 主催)	2016年6月	招待講演	

20	創薬分野における機械学習応用と情報科学への期待	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	日本学術振興会 第181委員会「分子系の複 合電子機能」第24回研究会「進化する機械 学習 データマイニング:ディープラーニング への発展」(日本学術振興会・産学協力委員 会 主催)	2016年6月	招待講演	
21	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	旭化成ファーマ株式会社 社内講演会(旭 化成ファーマ株式会社 医薬研究センター 合成化学研究部 主催)	2016年6月	招待講演	
22	スパコン・ビッグデータ時代における創薬のご紹介について	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	大塚製薬株式会社社内講演(大塚製薬株式 会社 主催)	2016年7月	招待講演	
23	バイオインフォマティクスの臨床応用に向けて「Bioinformatics」か ら「Biomedical informatics」へ	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第2回クリニカルバイオバンク研究会シンポ ジウム(クリニカルバイオバンク研究会 主 催)	2016年7月	招待講演	
24	化合物-タンパク質-フェノタイプの多階層モデルによる標的タン パク質予測	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科), 岩田浩明(京 都大学大学院 医学研究科)	第39回ケモインフォマティクス討論会(日本 化学会情報化学部会 主催)	2016年9月	招待講演	
25	ビッグデータからの予測医療と精密医療	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第82回バイオメクフォーラム21研究会(バイ オメクフォーラム21研究会BioMecForum21 主催)	2016年10月	招待講演	

26	ポスト京が拓く創薬計算の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	ATI2016年度第1回バイオ単分子研究会(公益財団法人 新世代研究所 主催)	2016年10月	招待講演	
27	「人工知能×医療の今後」スパコン・ビッグデータ時代の創薬と医療	奥野恭史(京都大学)	PBI公開講座「医療産業イノベーションフォーラム」(東京大学大学院薬学系研究科 寄付講座 ファーマコビジネス・イノベーション教室 主催)	2016年11月	招待講演	
28	「化合物-タンパク質-フェノタイプ」の多階層数理モデルの開発」	岩田浩明(京都大学大学院医学研究科)	CREST「ビッグデータ応用」若手合宿(CREST 主催)	2016年11月	口頭発表	
29	スパコン・ビッグデータが拓くIT創薬の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	ImPACT未来開拓研究会2016(国立研究開発法人 科学技術振興機構 革新的研究開発推進プログラム 主催)	2016年11月	招待講演	
30	スパコン・ビッグデータ時代の創薬	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	第44回構造活性相関シンポジウム・第31回農薬デザイン研究会(日本薬学会構造活性相関部会・日本農薬学会農薬デザイン研究会 主催)	2016年11月	招待講演	
31	人工知能・シミュレーション技術の創薬応用	奥野恭史(京都大学)	生命情報と人工知能セミナー「情報生命科学特別講義Ⅲ」	2016年11月	招待講演	

32	化合物-タンパク質-フェノタイプの多階層数理モデルの開発	岩田浩明(京都大学)	CREST「ビッグデータ応用」若手合宿	2016年11月	口頭発表
33	シミュレーション・人工知能が拓く創薬と医療の未来	奥野恭史(京都大学)	シスメックス技術成果発表会	2016年12月	招待講演
34	産学連携コンソーシアムによる創薬計算基盤の構築	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	応用数理ものづくり研究会 第15回技術セミナー(日本応用数理学会 主催)	2016年12月	招待講演
35	計算科学・情報科学が拓く創薬の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第30回分子シミュレーション討論会(分子シミュレーション研究会 主催)	2016年12月	招待講演
36	ビッグデータ・スパコンが拓く医療・創薬の未来	奥野恭史(京都大学大学院)	第9回BKCバイオインフォマティクス研究会 立命館大学(立命館大学 生命情報学科 主催)2017.2.1	2017年2月	招待講演
37	医療ビッグデータサイエンティスト養成プログラムについて	奥野恭史(京都大学)	高度医療専門職大学院シンポジウム「人間健康科学科の未来像を語る」(京都大学大学院 医学研究科人間健康科学系専攻 主催)	2017年2月	招待講演

38	～AIとライフサイエンスの今後の展望～	奥野恭史(京都大学)	AI×Life Scienceシンポジウム(一般社団法人 ライフサイエンス・イノベーション・ネットワーク・ジャパン(LINK-J) 主催)	2017年5月	基調講演	
39	人工知能が拓く創薬の未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	“未来へのバイオ技術”勉強会「AIが生み出すこれからの産業・市場・社会」(一般財団法人 バイオインダストリー協会 主催)	2017年7月	招待講演	
40	創薬化学における人工知能の展望	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	AIと有機合成化学(有機合成化学協会 主催)	2017年7月	招待講演	
41	医療・創薬におけるビッグデータの可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第18回 薬制研究会(薬制研究会 主催)	2017年7月	招待講演	
42	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	よこはまNMR研究会	2017年9月	招待講演	
43	GPCR構造決定後に求められるインシリコ解析について	広川貴次(産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター)	日本バイオインフォマティクス学会 創薬インフォマティクス研究会	2017年9月	口頭発表	

44	人工知能・スパコンで挑む創薬	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	2017年度東京大学医学部基礎臨床社会医学統合講義	2017年9月	招待講演
45	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	大阪医薬品協会セミナー	2017年10月	招待講演
46	ゲノム医療の実装に資する臨床ゲノム情報統合データベースの整備と我が国の継続的なゲノム医療実施体制の構築	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第15回全国遺伝子医療部門連絡会議(2017.11.18)	2017年11月	招待講演
47	AIで描く未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	Health2.0 Asia-Japan 2017	2017年12月	招待講演
48	分子動力学シミュレーションによる臨床ゲノム情報からの薬剤反応性予測	池口茉莉恵、濱谷 枝里、鎌田真由美、荒木望嗣、奥野恭史(京都大学)	第53回BIO研究発表会—情報処理学会	2018年2月	ポスター発表
49	産官学連携で目指すAI創薬 ライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)の取組みについて	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科、理化学研究所科技ハブ産連本部)	経済産業省ヘルスケアIT研究会	2018年4月	招待講演

50	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	理研 創薬・医療技術基盤プログラム 第4 回ワークショップ	2018年11月	招待講演	
51	ビッグデータ・AIが拓く医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	脳心血管抗加齢研究会2018	2018年12月	招待講演	
52	AIが拓く創薬・医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	東北大学 講演会	2019年1月	招待講演	
53	医療におけるビッグデータ・AIの可能性	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第41回近畿小児血液・がん研究会	2019年2月	招待講演	
54	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	千葉大学キックオフミーティング:自動問診 項目解析による診断支援システムの研究	2019年3月	招待講演	
55	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	公益財団法人医療科学研究所 産官学少 人数懇談会	2019年3月	招待講演	

5. 一般向け講演会

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(講演会名等)	発表した時期	口頭・ポ スター発表の別	招待講演 (○を記入)
-----	--------------	-------	---------------	--------	-----------------	----------------

1	「時系列臨床データの解析とシミュレーションに基づく予測医療」	奥野恭史(京都大学大学院 京都大学大学院)	日本・デンマーク・ライフサイエンスセミナー 『健康・医療ビッグデータとバイオバンクの活用』～ QOLの向上とより健康的な生活のためのデンマーク・日本両国の取組み～(デンマーク大使館、大阪商工会議所 主催)	2015年11月	招待講演	
2	次世代スーパーコンピュータ・ポスト「京」が拓く創薬計算の未来	奥野恭史(京都大学大学院 京都大学大学院)	第20回「プロテイン・モールド関西」情報交流 セミナー(プロテイン・モールド関西、公益財団法人千里ライフサイエンス振興財団 主催)	2015年11月	招待講演	
3	第2編 タンパク質からみる生命科学2.3「分子動力学計算によるタンパク質の機能解析」	中津井雅彦(京都大学大学院)	遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎(Ⅱ) 生命科学と理工学の融合による生命理解と健康・医療への応用」(神戸大学計算科学教育センター 主催)	2015年11月	講義	
4	「HPC で挑む創薬イノベーション」	奥野恭史(京都大学大学院)	東京 Day 2: HPC Developer Conference- UNLEASH YOUR CODE'S POTENTIAL - (インテル コーポレーション、インテル株式会社 主催)	2015年12月	招待講演	
5	スーパーコンピュータの今とこれから	奥野恭史(京都大学大学院)	スパコン「京」がひらく科学と社会シンポジウム(理化学研究所計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構 主催)	2016年1月	招待講演	
6	第3編 医療・創薬における計算生命科学3.3「創薬と医療のためのシミュレーション科学とビッグデータ科学」	奥野恭史(京都大学大学院)	遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎(Ⅱ) 生命科学と理工学の融合による生命理解と健康・医療への応用」(神戸大学計算科学教育センター 主催)	2016年1月	講義	
7	スパコンで目指す速い・安い・うまい薬づくり～病気の原因分子と薬の作用を予測する～	奥野恭史(京都大学大学院)	スパコンを知る集いin高松～「京」からポスト「京」へ～(理化学研究所 計算科学研究機構 主催)	2016年2月	招待講演	
8	スパコン・ビッグデータ時代における創薬	奥野恭史(京都大学大学院)	第7回製薬CIOフォーラム	2016年3月	招待講演	
9	創薬・生命科学のためのシミュレーション研究基盤の構築	奥野恭史(国立大学法人 京都大学大学院 医学研究科)	セミナー「インシリコ創薬の展望」公益財団法人先端医療振興財団 臨床研究情報センター 主催	2016年4月	招待講演	
10	スーパーコンピュータと人工知能で挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	岡山大学病院 市民フォーラム「ゲノム医療と科学の最先端」	2016年5月	招待講演	
11	「コンピュータで挑む創薬と医療」	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	スーパーサイエンスハイスクール 釜崎高校 特別講義	2016年7月	講義	
12	スーパーコンピュータとタイムマシン	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	第6回慶應義塾大学GESL (Global Environmental System Leaders) セミナー (慶應義塾大学GESL事務局 主催)	2016年9月	招待講演	
13	健康未来予測: ビッグデータ研究最前線	奥野恭史(京都大学大学院 医学研究科)	弘前大学COIヘルシーエイジング・イノベーションフォーラム～健康「ビッグデータ」研究最前線～(国立大学法人 弘前大学・青森県・弘前市 主催)	2016年9月	招待講演	

14	医療・創薬におけるICTの可能性	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	ライフサイエンス・アントレプレナー入門塾～第5回「ライフサイエンスビジネスMOT」講座(神戸大学連携創造本部・公益財団法人都市活力研究所 主催)	2016年9月	招待講演	
15	HPCと連携した高精度予測計算用創薬アプリケーションの開発と展望	藤田淳人(公益財団法人先端医療振興財団 クラスタ推進センター)	VINAS Users Conference 2016「医療・創薬と大規模解析」(株式会社ヴァイナス 主催)	2016年10月	招待講演	
16	スーパーコンピュータが拓く創薬計算の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	VINAS Users Conference 2016「医療・創薬と大規模解析」(株式会社ヴァイナス 主催)	2016年10月	基調講演	
17	ビッグデータ・人工知能の医療創薬における可能性	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	Scramble Crossing Forum October 11,2016 (MSD株式会社 主催)	2016年10月	招待講演	
18	「人工知能×医療の今後」スパコン・ビッグデータ時代の創薬と医療	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	PBI公開講座「医療産業イノベーションフォーラム」(東京大学大学院薬学系研究科 寄付講座 ファーマコビジネス・イノベーション教室 主催)	2016年11月	招待講演	
19	スーパーコンピュータで目指す創薬と医療の未来	中津井雅彦(京都大学大学院医学研究科)	平成28年度 石川県高等学校文化連盟理科部秋期行事「高校生のための実験・実習セミナー」(石川県高等学校文化連盟 主催)	2016年11月	講義	
20	人工知能・シミュレーション技術の創薬応用	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	生命情報と人工知能セミナー「情報生命科学特別講義Ⅲ」(産業技術総合研究所人工知能研究センター(AIRC)・東京大学大学院新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻 主催)	2016年11月	招待講演	
21	シミュレーション・人工知能が拓く創薬と医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	シスメックス技術成果発表会(シスメックス株式会社 主催)	2016年12月	招待講演	
22	未来を予測する、未来を変える～タイムマシンとスーパーコンピュータ～	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	あこがれ“いこまびと”講演会 生駒市立光明中学校(生駒市 主催)	2016年12月	基調講演	
23	スーパーコンピュータ・人工知能で挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学)	サントリー社内セミナー(サントリーグローバルイノベーションセンター株式会社 主催)	2017年2月	招待講演	
24	日経ビッグデータ 読者セミナー「いよいよ活用元年 ビッグデータ×AI×IoTが生み出す経済インパクトを生む年へ」	奥野恭史(京都大学)	日経ビッグデータ 読者セミナー	2017年2月	招待講演	
25	産学連携コンソーシアムで挑むライフサイエンス分野におけるAI戦略	奥野恭史(京都大学大学院)	日経ビッグデータ 読者セミナー「いよいよ活用元年 ビッグデータ×AI×IoTが生み出す経済インパクトを生む年へ」(日経BP社 主催)2017.2.27	2017年2月	招待講演	
26	第2回ITソリューション展 ビッグデータが拓く新しい医療「医療・創薬におけるビッグデータの可能性」	奥野恭史(京都大学大学院)	メディカル ジャパン 第3回日本医療総合展 大阪(リード エグジジション ジャパン株式会社 主催)(2017.2.15)	2017年2月	招待講演	
27	ビッグデータ・スーパーコンピュータが拓く創薬の未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	ヘルスケアIT 2017(UBMジャパン株式会社 主催)	2017年4月	招待講演	
28	「ビッグデータ・スーパーコンピュータが拓く創薬の未来」	奥野恭史(京都大学大学院)	ヘルスケアIT 2017(UBMジャパン株式会社 主催)(2017.4.21)	2017年4月	招待講演	

29	AIが生み出すこれからの産業・市場・社会	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	富士通フォーラム大阪2017	2017年5月	招待講演	
30	ビッグデータ・人工知能が拓く医療の未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	First Penguin Salon(株式会社オズマピーアール 主催)	2017年5月	招待講演	
31	「ビッグデータ・人工知能が拓く医療の未来」	奥野恭史(京都大学大学院)	First Penguin Salon(株式会社オズマピーアール 主催)(2017.5.10)	2017年5月	招待講演	
32	ビッグデータ・AIで挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学大学院)	第8回Pharma AI Forum(PHAIFO)(株式会社シード・プランニング 主催)(2017.6.22)	2017年6月	招待講演	
33	スパコン・AIで挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学)	第30回インターフェックスジャパン2017	2017年6月	招待講演	
34	AI創薬の現状と可能性「ChemistはAIによりどのように創薬を加速できるか」	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	AI創薬JTオフサイトミーティング(日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所 主催)	2017年7月	招待講演	
35	コンピュータで挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	スーパーサイエンスハイスクール葦崎高校 特別講義	2017年7月	講義	
36	スーパーコンピュータ・人工知能が拓く創薬と医療の未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	第33回創薬セミナー(公益社団法人 日本薬学会 創薬セミナー委員会 主催)	2017年7月	招待講演	
37	ChemistはAIによりどのように創薬を加速できるか	奥野恭史(京都大学)	AI創薬オフサイトミーティング(日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所 主催)	2017年7月	招待講演	
38	AI×ビッグデータが織り成す新たな未来！ヘルスケア分野からみるAI産業革命の可能性～	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	富士通フォーラム2017 大阪(富士通株式会社 主催)	2017年8月	招待講演	
39	AI×ビッグデータが織り成す新たな未来！～ヘルスケア分野からみるAI産業革命の可能性～	奥野恭史(京都大学)	富士通フォーラム2017 大阪(富士通株式会社 主催)	2017年8月	招待講演	
40	スーパーコンピュータで薬をつくる～病気の原因分子と薬の作用を予測する～	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	理化学研究所・計算科学研究機構 スパコンセミナー	2017年9月	招待講演	
41	ディープラーニングの計算原理	種石 慶(理化学研究所)	遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎(IV)～特別編～」(神戸大学計算科学教育センター 主催)	2017年9月	講義	
42	ビッグデータ・人工知能が拓く医療・創薬の未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	ライサ5周年設立記念	2017年9月	招待講演	
43	AI創薬の現状と可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	VINAS Users Conference 2017	2017年10月	招待講演	
44	K4:スーパーコンピュータと連携したインシリコ創薬アプリケーション	馬 彪(先端医療振興財団)	VINAS Users Conference 2017	2017年10月	招待講演	
45	AIが拓くパラダイムシフト	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	製薬協メディアフォーラム2017	2017年11月	招待講演	
46	AI創薬の現状と未来	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	徳島大学薬学部講義	2017年11月	講義	

47	Prediction of interactions from compounds to target proteins and from target proteins to phenotypes	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	The 5th Autumn School of Chemoinformatics in Nara	2017年11月	招待講演	
48	ケミカル情報とバイオ情報の相互作用ビッグデータ解析	藤原 大(京都大学)	CREST「ビッグデータ応用」若手合宿 (CREST 主催、2017.11.25)	2017年11月	講演	
49	創薬・医療・ものづくりにおけるAI戦略	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	富士フィルム株式会社生産技術シンポジウム	2017年11月	招待講演	
50	AI創薬にかかる期待	種石 慶(理化学研究所)	インテル株式会社主催記者説明会	2017年12月	招待講演	
51	より深い計算創薬へ	種石 慶(理化学研究所)	NVIDIA主催記者説明会	2017年12月	招待講演	
52	医療・創薬におけるビッグデータ・AIの可能性	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	東京医科歯科大学 データ関連人材プログラムカリキュラム	2017年12月	招待講演	
53	Development of a molecular simulation platform for genomic medicine:Simulation study for multi-conformational analysis of biomolecule by assimilation of single particle XFEL data	徳久淳師(理化学研究所)	理化学研究所主催 第31回量子系分子科学セミナー	2018年1月	講義	
54	Precision Medicineと医療ビッグデータ解析1	中津井雅彦(京都大学)	理化学研究所 健康“生き活き”羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム 人材育成プログラムシリーズ(2018.1.25)	2018年1月	招待講演	
55	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	クラリベイト・アナリティクス講演会(東京)	2018年2月	招待講演	
56	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	クラリベイト・アナリティクス講演会(大阪)	2018年2月	招待講演	
57	産学官連携で目指すAI創薬:ライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)の取り組みについて	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	自民党人工知能未来社会経済戦略本部講演会(自民党主催)	2018年2月	招待講演	
58	産学連携で目指すAI医療	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	千葉大学講演会	2018年2月	招待講演	
59	AI・ビッグデータが拓く創薬・医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	富士通DDWorksユーザ会	2018年3月	招待講演	
60	AI・ビッグデータが拓く創薬・医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	ファイザー株式会社講演会	2018年3月	招待講演	
61	AI創薬の現状と未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	岐阜薬科大学・大学院創薬学演習講義	2018年6月	講義	
62	AI、スパコンで挑むゲノム医療、創薬	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	京都大学薬学部第15回生涯教育講演会	2018年7月	講演	
63	スーパーコンピュータと人工知能で挑む創薬と医療	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	スーパーサイエンスハイスクール 葦崎高校 特別講義	2018年7月	講義	
64	より論理的な分子設計を目指したインシリコ創薬支援	広川貴次(産業技術総合研究所)	私大戦略的研究基盤形成支援事業「稀少疾患・難治疾患の原因究明と治療法の開発に向けた基盤研究」第4回稀少疾患セミ	2018年9月	講演	

65	ビッグデータ・AIが拓く医療・創薬の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	ノバルティスファーマ株式会社講演会	2018年10月	招待講演	
66	人工知能が拓く創薬・医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	帝人ファーマ株式会社講演会	2018年10月	招待講演	
67	構造データベースを活用した インシリコ創薬支援研究	広川貴次(産業技術総合研究所)	トーゴーの日シンポジウム2018	2018年10月	講演	
68	AIが拓く医療・創薬のイノベーション	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	情報化連携推進機構	2018年11月	招待講演	
69	AIが拓く創薬・医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	技術同友会	2018年12月	招待講演	
70	ビッグデータ・AIが拓く創薬・医療の未来	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	IQVIA講演会	2018年12月	招待講演	
71	生命現象の科学とそのシミュレーション	徳久淳師、金田 亮(理化学研究所)	リサーチコンプレックスセミナー 2018人材育成プログラムシリーズ 第10回	2019年2月	講義	
72	AIが拓く創薬イノベーション	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	山口大学医学部講演会	2019年3月	招待講演	
73	産学連携で目指すAI創薬革命	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	京都府京大オフィス産学連携セミナー	2019年3月	招待講演	

6. 書籍

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(書籍名等)	発表した時期		
1	人工知能・機械学習・ディープラーニング関連技術とその活用	岩田浩明(先端医療振興財団), 種石慶(理化学研究所), 奥野恭史(国立大学法人 京都大学大学院 医学研究科)	(株)情報機構	2016年6月		
2	創薬シリーズ(8) 創薬研究の新潮流14「スパコン「京」によるインシリコ創薬」	中津井雅彦, 鎌田真由美, 荒木望嗣, 奥野恭史(京都大学)	日本薬理学雑誌149(6),281-287	2017年6月		
3	Precision Medicine実現に必要なシミュレーション科学とデータ科学(data centric science)	佐藤憲明, 内野詠一郎, 鎌田真由美, 奥野恭史(京都大学)	科学評論社, 腫瘍内科: 20(4), 306-312, 2017	2017年10月		
4	人工知能と医療のハーモニー「人工知能を用いたビッグデータ創薬」	藤原 大, 中津井雅彦, 奥野恭史(京都大学)	医歯薬出版, 医学のあゆみ Vol. 263, No. 8 (2017.11.25)	2017年11月		
5	あなたのラボにAI(人工知能)×ロボットがやってくる「創薬とAIの良好な関係」	種石 慶(理化学研究所), 岩田浩明, 小島諒介, 奥野恭史(京都大学)	羊土社「実験医学」別冊 P50-53 (2017.12)	2017年12月		

6	「in silico創薬におけるスクリーニングの高速化・高精度化技術」 2章1節 スーパーコンピュータによる創薬プロセスの高速化と精度向上	徳久淳師、金田亮(理化学研究所), 岩田浩明、奥野恭史(京都大学)	技術情報協会(2018.1.31発刊)	2018年1月		
7	「in silico創薬におけるスクリーニングの高速化・高精度化技術」 7章6節 神戸医療産業都市におけるインシリコ創薬拠点の構築と創薬推進の取り組み	田宮憲一、馬彪、井阪悠太(先端医療振興財団)	技術情報協会(2018.1.31発刊)	2018年1月		
8	AI導入によるバイオテクノロジーの発展	徳久淳師、奥野恭史(京都大学), 種石 慶(理化学研究所)	(株)シーエムシー出版 P85-93(2018.2.9)	2018年2月		
9	スーパーコンピュータが可能にする医療と創薬	内野詠一郎、中津井雅彦、奥野恭史(京都大学)	科学評論社、月刊腎臓内科・泌尿器科7巻2号、160-164(2018.2.28)	2018年2月		
10	最先端研究:ビッグデータ解析と分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬	千葉峻太郎, 荒木望嗣, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日本シミュレーション学会発行、シミュレーション 37(1), 42-49	2018年3月		
11	人工知能を用いた創薬(AI創薬)	藤原 大, 鎌田真由美, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	癌と化学療法 45(4), 593-596	2018年4月		
12	スーパーコンピュータ・人工知能によるインシリコ創薬	岩田浩明, 荒木望嗣, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	化学工業社、化学工業 69(5), 58-66	2018年5月		
13	集合知によるAI創薬の展開-ライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)	荒木通啓, 中津井正彦, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	国際医薬品情報 1106, 16-22	2018年5月		
14	ビッグデータ時代のゲノム創薬	内野詠一郎, 荒木通啓, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	分子精神医学 2018年7月号	2018年7月		
15	AIを用いた創薬の実際と今後の展望	小島諒介, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	INNERVISION 33(7), 71-73	2018年8月		
16	次世代創薬シミュレーション	荒木望嗣, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	医学書院、生体の科学 69(4), 310-314	2018年8月		

17	がんゲノム医療用知識データベース	中津井雅彦, 鎌田真由美, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	実験医学 増刊 36(15), 36-40	2018年9月		
18	人工知能(AI)がもたらす創薬イノベーション」1. 序文～LINCの設立とAI創薬～	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科、理化学研究所科技ハブ産連本部)、水口賢	医薬ジャーナル 54(9) 65-67	2018年9月		
19	人工知能(AI)がもたらす創薬イノベーション」2. 予防・先制医療における疾患発症予測モデルと細菌叢	内野詠一郎, 佐藤憲明, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	医薬ジャーナル 54(9), 69-72	2018年9月		
20	疾患レジストリーと知識データベース	奥野恭史, 中津井雅彦, 鎌田真由美(京都大学大学院医学研究科)	日本医師会雑誌 第147巻第7号, 1395-1399, 平成30年10月1日発行	2018年10月		
21	非小細胞肺癌(NSCLC)における薬剤耐性獲得メカニズムの予測	荒木望嗣, 奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	メディカルレビュー社、がん分子標的治療 16(3), 53-58	2018年10月		
22	AIと創薬—コンピュータ支援有機合成の現在	松原誠二郎(京都大学大学院工学研究科)、寺山 慧(理化学研究所 革新知能統合研究センター、京都大学大)	日本薬学会発行、MEDCHEM NEWS 28(4), 181-186	2018年11月		
23	AIと創薬—序文 特集にあたって	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科、理化学研究所科技ハブ産連本部)	日本薬学会発行、MEDCHEM NEWS 28(4), 160-162	2018年11月		
24	スーパーコンピュータと創薬	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	実教出版、サイエンスビュー化学総合資料 四訂版第2刷	2018年11月		

7. 新聞/TV/WEB配信/広報誌/雑誌/等のメディア

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(媒体名等)	発表した時期	分類	
1	「予測精度80-90% 血液検査値3種から客観判断終末期の治療最適化」	奥野恭史(京都大学大学院)	日刊工業新聞 2015年10月1日掲載	2015年10月	新聞	
2	「京大、製薬会社が“創薬ビッグデータ”で新手法 ディープラーニングで学習データを10倍以上に」	奥野恭史(京都大学大学院)	日経BP社 日経BigData 2015年10月5日(16P)	2015年10月	雑誌	
3	サイエンスZERO 『これが世界一のシミュレーション！スーパーコンピュータ「京」』	奥野恭史(京都大学大学院)	NHK サイエンスZERO 2015.10.4放送	2015年10月	TV	
4	「予測医療 現状と展望は 弘大でCOI特別講演会」	奥野恭史(京都大学大学院)	陸奥新報 2016年1月9日(5面)	2016年1月	新聞	
5	「医療ビッグデータからの創薬、予防医療、並びに京大病院 Biobank & Informatics for Cancer プロジェクトの概要」	奥野恭史(京都大学大学院)	平成27年度 創薬資源調査報告書「医療ビッグデータの活用並びにバイオマーカー実用化の最新動向」—創薬並びに個別化医療や予防医療への可能性を探る—(22P-35P)	2016年2月	冊子	
6	スパコン「京」の後継、「最速」は目標にせず	奥野恭史(京都大学大学院)	朝日新聞 2016年2月25日(33面)	2016年2月	新聞	
7	Supercomputer K Opens Doors to the Future (re)	Okuno Yasushi(Kyoto University)	NHK World Science View	2016年4月	TV	
8	健康“生き活き”羅針盤リサーチコンプレックス事業開始記念シンポジウム 個別健康の最大化～“ヒト(human)”を軸とした異分野融合研究開発の推進～	奥野恭史(国立大学法人 京都大学大学院 医学研究科)	読売新聞	2016年5月	Web配信(動画なし)	

9	Superior Performance Commits Kyoto University to GPUs Over GPUs	Yasushi Okuno(kyoto university)	insideHPC(Web)	2016年7月	Web配信(動画なし)	
10	「医で拓く関西⑤ iPSと「京」強みに」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	読売新聞(12面)	2016年7月	新聞	
11	スーパーコンピュータ「京」を基盤とした創薬オープンイノベーション	奥野恭史(国立大学法人 京都大学大学院 医学研究科)	PHARMA TECH JAPAN Vol.32 No.9 August 2016 別冊	2016年8月	雑誌	
12	末期がん余命予測～京大と理研 血中成分から～	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日経新聞(15面)	2016年8月	新聞	
13	G7で神戸猛アピール 医療産業や「京」手応えも	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	神戸新聞NEXT(社会面)	2016年9月	新聞	
14	G7保健相が「京」視察 iPS関連技術も紹介	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日経新聞(地方経済面)	2016年9月	新聞	
15	『これが世界一のシミュレーション！スーパーコンピュータ「京」』	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	NHKオンデマンド(Web)サイエンスZERO	2016年9月	TV	
16	「ゲノムと病因をAIで解析 京大など、個人別の最適治療めざす」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日本経済新聞	2016年10月	新聞	
17	「京大と富士通、平成28年度の日本医療研究開発機構「臨床ゲノム情報統合データベース整備事業」に採択」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	朝日新聞&M 企業リリース(Web)	2016年10月	Web配信(動画なし)	
18	「医療用ワトソン、日本版開発へ 人工知能で治療法探る」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	朝日新聞(Web)	2016年10月	Web配信(動画なし)	
19	「創薬AIで50社連合 武田やNEC 新薬探し短縮、成功率高め国際競争力」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日本経済新聞	2016年11月	新聞	
20	「富士通、AI「Zinrai」関連のサービス5種を開発～世界最速クラスのディープラーニング基盤と、業種・業務に対応したAIサービスを提供～」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	朝日新聞&M 企業リリース(Web)	2016年11月	Web配信(動画なし)	
21	創薬AIで50社連合 武田やNEC 新薬探し短縮、成功率高め国際競争力	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	日本経済新聞 2016年11月16日	2016年11月	新聞	
22	「医療・医学の発展をリードしてきた京大病院の新たなチャレンジ～ビジョンは「データサイエンスの拠点」統合データウェアハウスがデータ活用の中核を担う～」	中津井雅彦(京都大学大学院 医学研究科)	日経デジタルヘルス(Web)	2016年12月	Web配信(動画なし)	
23	「密着!命の現場最前線 日本初ドクターヘリ&移動処置室の“劇的救命”に迫る!～ビッグデータが医療の未来を変える!病気予防の新常識とは?!～」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	BS-TBS	2016年12月	TV	
24	創薬は、ビッグデータ活用で激変する	奥野恭史(京都大学大学院)	2017年1月17日 Top Researchers(Web)	2017年1月	Web配信(動画なし)	
25	「創薬 新潮流④ 新薬の候補物質探索 スパコン・AIが活躍 開発期間やコスト低減 ビッグデータの充実が後押し」	奥野恭史(京都大学大学院)	2017年3月6日 日本経済新聞	2017年3月	新聞	
26	創薬 新潮流④ 新薬の候補物質探索 スパコン・AIが活躍 開発期間やコスト低減 ビッグデータの充実が後押し	奥野恭史(京都大学)	日本経済新聞 2017年3月6日	2017年3月	新聞	
27	創薬は、ビッグデータ活用で激変する	奥野恭史(京都大学)	株式会社 経営共創基盤 共創IGPI レポート 2017春号vol.26、8-10(2017.5.17)	2017年5月	広報誌	

28	がん治療AIがサポート 患者データ解析 適薬提案 実用化へ開発進む	奥野恭史(京都大学)	読売新聞(2017.6.11)	2017年6月	新聞	
29	AI創薬について	奥野恭史(京都大学)	TBSラジオ THE FROGMAN SHOW AI.共存ラジオ「好奇心家族」(2017.10.24)	2017年10月	その他[ラジオ]	
30	創薬で用いられ始めた人工知能	奥野恭史(京都大学)	日経バイオテック(2017.10.9)	2017年10月	雑誌	
31	命の費用対効果「AIは画期的な薬を生み出せるのか？」	奥野恭史(京都大学)	朝日新聞 Web版GLOBE(2017.10.19)	2017年10月	新聞	
32	LINC、3年後めどに『創薬AI』構築へ、新薬企業など89機関が参加 30プロジェクトが始動	奥野恭史(京都大学)	日刊薬業(2017.11.7)	2017年11月	新聞	
33	これまでの創薬の“常識”をくつがえす新薬たち	奥野恭史(京都大学、理化学研究所)	ニュートンプレス社 Newton別冊MOOKくすりの科学(2017.12.5)	2017年12月	雑誌	
34	病気の原因を見極めるゲノム解析に深層学習、理研や京大などが2018年3月から	奥野恭史(京都大学)	速報ITpro 日経BP(2017.12.5)	2017年12月	Web配信(動画なし)	
35	医療健康分野におけるAI/ビッグデータの活用について	奥野恭史(京都大学)	JPMA NEWS LETTER 2018年1月号	2018年1月	広報誌	
36	日本人のためのゲノム医療用AI、2018年度中に試行開始	鎌田真由美、奥野恭史(京都大学)	医学書院、週刊医学界新聞 第3254号(2018.1.1)	2018年1月	新聞	
37	ビッグデータの創薬への応用	榎石 慶(理化学研究所), 徳久淳師、奥野恭史(京都大学)	EPSホールディングス「遙か」Vol.11(2018.2)	2018年2月	広報誌	
38	新薬開発によく効く100社で挑む創薬AI	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日経コンピュータ	2018年6月	雑誌	
39	理研の最前線14: 科学技術ハブ 奥野恭史	奥野恭史(理化学研究所)	日刊工業新聞	2018年6月	新聞	
40	サイエンスBOX 完成したら当たり前の技術 それでもいい 創薬コスト AIで半減	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	読売新聞	2018年7月	新聞	
41	サイエンスView 次世代スパコン「ポスト京」で変わる社会「使い勝手けた違い」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	読売新聞	2018年7月	新聞	
42	薬開発 AIで早く	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日本経済新聞	2018年8月	新聞	
43	ニュース: 創薬AI開発の産学連携プロジェクト、「大半が順調」	奥野恭史(京都大学大学院医学研究科)	日経XTECH	2018年9月	Web配信(動画なし)	
44	AI創薬 イノベーションへ新たな挑戦	奥野恭史(理化学研究所、京都大学大学院医学研究科)	化学工業日報 CCSコンピューターケミストリーシステム第2部	2018年12月	新聞	
45	創薬を加速する心毒性スクリーニングシステムの開発	寺田透, 根上樹(東京大学), 奥野恭史(京都大学), 久田俊明(株)UIT-Heart研究所)	ポスト「京」重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 NEWS LETTER Vol.12	2019年2月	広報誌	
46	「AI活用の未来考える 左京で府などセミナー」(京都府産学連携ものづくり支援セミナー)	奥野恭史(理化学研究所、京都大学大学院医学研究科)	京都新聞	2019年3月	新聞	

8. 特許出願・取得

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	出願人	発表した時期	出願番号
-----	--------------	-------	-----	--------	------

1	化合物設計装置、化合物設計方法、及びコンピュータプログラム	奥野恭史(国立大学法人 京都大学 京都大学大学院 医学研究科), 金井千里((株) 京都コンステラ・テクノロジーズ), 吉川達也((株) 京都コンステラ・テクノロジーズ), 多門啓子((株) 京都コンステラ・テクノロジーズ)	国立大学法人 京都大学, (株) 京都コンステラ・テクノロジーズ	2015年8月	2014-532989 (2015年8月24日)	
---	-------------------------------	--	----------------------------------	---------	-----------------------------	--