

インシリコユニット代表課題名（9課題）

分子動力学計算による構造生物学データを
活用した構造ダイナミクス研究
（横浜市立大）

モデリングとシミュレーションによる
生体高分子の構造機能解析
（量子科学技術研究開発機構）

大規模分子シミュレーションによるインシリコスクリー
ニング支援と構造インフォマティクス技術の高度化
（東京工業大学）

タンパク質の複合体構造・分子間相互
作用・ダイナミクス・機能の予測と解析
（東京大学）

分子モデリングおよびシミュレーションを
活用したインシリコ創薬支援
（産業技術総合研究所）

構造インフォマティクスとFMO計算を融合
したインシリコスクリーニング支援研究
（理化学研究所）

バイオマーカーおよび治療法開発を
加速するデータ駆動型モデリング
（大阪大学）

タンパク質の高次構造情報を利用した創薬等研究
加速に向けたバイオインフォマティクス研究
（産業技術総合研究所）

生薬データベースの高度化と
構造創薬への応用
（奈良先端科学技術大学院大学）

主にシミュレーションによるアプローチ

主に複合技術によるアプローチ

主にインフォマティクスによるアプローチ