

## 基盤医学特論 Tokuron Special Lecture

メディカルAI人材養成産学協働拠点(AI-MAILs)／卓越大学院プログラムCIBoG特徴あるプログラム「メディカルAI」

# AIを活用した創薬研究のパラダイムシフト

## Paradigm Shift in Drug Discovery Utilizing Artificial Intelligence

Axcelead Drug Discovery Partners 主任研究員 奥野達矢

講演 60分 + Q&A 30分



概要：創薬研究は多大なコストと期間を要し、創薬標的の枯渇や創薬成功確率の低下など厳しい状況に直面している。その中で、ビッグデータ時代の到来とAI技術の進展により、AI創薬（AI技術を用いたデータ駆動型創薬）による創薬研究の効率化・成功確率向上へと期待が寄せられている。この講義では、最初に創薬研究のプロセスと創薬研究を取り巻く課題について概説し、AI創薬の現場での実践と展望について解説する。創薬標的の同定に向けた技術として、マルチモーダルな機械学習を用いたナレッジ抽出について触れる。これは、文献情報やマルチオミクスデータを活用し、疾患（表現型）・標的・薬剤といった多層的な役者間の関係性を解析することで、創薬標的を同定・検証し、合理的な創薬の礎を築く技術である。AI技術を用いた化合物構造の最適化についても注目されており、成功例が出てきている。その要素技術として化合物の物性や生理活性を予測するAI技術や所望の活性を有する化合物構造を生成するAI技術について紹介する。また、タンパク質構造に基づく合理的創薬を支える技術としてAlphaFold2とその応用についても議論する。

日時： 2024年2月29日（木）Zoom 午後5時から午後6時半

Date: Feb. 29, 2024 (Thu.) 17:00 – 18:30

言語： 発表&パワーポイント：日本語

Language : Presentation & PowerPoint: Japanese

連絡先： AI-MAILs 浅井 (AI-MAILs 事務局内 5538)

Contact: Ms. Sayuri Asai, Secretariat of AI-MAILs (ext. 5538)

注意： 事前登録が必要です。

Note : Pre-registration is required

- \* Zoomにて開催します。前週金曜日に学務課よりメールで送られる「TKR&TPRO 特論/特プロ開講通知」を確認し、講義開始時間までに事前登録をして下さい。

This lecture is held through Zoom. This lecture requires registration. Please register in advance by the start time of the lecture. The URL for class registration of this lecture will be announced by the e-mail "【med-all】TKR&TPRO Lectures Scheduled Coming Week" sent on Friday of the previous week. Please check emails regularly, when the lecture date of your choice approaches..

- \* 出席はTACTを用いて行います。TACTへ入力するキーワードは講義中にお知らせします。
- \* 講義について連絡事項が発生した場合はAI-MAILsウェブサイトで連絡します。

If we have any notice, we are going to announce it on our website. Please check our website sometimes..

<https://ai-mails.med.nagoya-u.ac.jp/>