



大阪公立大学  
Osaka Metropolitan University

第11回 創薬科学研究所セミナー  
第133回 生物科学フロンティアセミナー  
創薬科学副専攻「創薬科学特殊講義」

## AI・シミュレーションが拓く創薬の未来

### 奥野 恭史 先生

京都大学 大学院医学研究科 教授  
理化学研究所 計算科学研究センター 部門長

日時：令和 5 年 9 月 22 日（金）午後 1 時 15 分より  
場所：中百舌鳥キャンパス A13 棟 3 階 323 号室

事前参加申し込みは不要です。  
会場まで直接お越しください。



医薬品開発は、一般に、1,000 億円以上、10 年以上の多額の開発費と長い年月を有し、効率的な創薬が求められている。AI やシミュレーションは、その有力なソリューションの一つとして期待されている。

我々は、これまでに、創薬プロセスの上流から下流に至る各ステップの AI・シミュレーション技術（創薬標的探索や薬効・毒性等の活性予測やメカニズム解明、さらにはそれらを最適化条件とする化合物デザイン、臨床データからの副作用要因抽出などの計算技術）の開発を行ってきた。例えば、製薬企業 10 数社の化合物データを共有し、活性・ADMET を予測し、化学構造の生成する AI の開発を行っている。また、マルチオミクスなどの実験データ、臨床データなどの多種多様なデータを用いて、患者層別化、サンプル分類、分子メカニズムの解明、バイオマーカー推定、創薬標的分子探索などの AI 技術も開発している。本講義では、演者が取り組む具体的な事例を紹介しつつ、創薬における AI の現状と未来についてお話ししたい。

世話人・連絡先 中瀬生彦（大阪公立大学 大学院理学研究科 生物化学専攻）  
大阪公立大学 研究推進機構 創薬科学研究所（所長 乾隆）  
〒599-8531 大阪府堺市中区学園町 1-1  
TEL: 072-254-9895/ e-mail: i-nakase@omu.ac.jp