

AI・データ駆動型 創薬研究

マルチオミクス×ケモインフォマティクスで
より確実な治療標的を見つけ、薬をデザインする

序にかえて—日本の「AI・データ駆動型創薬研究」を俯瞰する

..... 袖木克之, 山西芳裕 3 (587)

第1章 創薬標的の探索

1. 細胞サーマルシフトアッセイによる標的タンパク質同定

..... 室井 誠, 川谷 誠, 真田英美子, 堂前 直, 長田裕之 16 (600)

2. タンパク質熱安定性解析による生命科学研究の新展開

..... 幡野 敦, 松本雅記 22 (606)

3. Lip-MS が拓く構造変化に基づく薬物標的探索戦略

..... 小形公亮, 石濱 泰 28 (612)

4. メタボローム解析によるマーカー探索

..... 三枝大輔 34 (618)

5. 画像駆動型共変動ネットワーク解析：時間変化相関と細胞間相関から捉える 細胞システム

..... 村田昌之, 加納ふみ 43 (627)

6. 「認知の律速」を突破するAI駆動知識掘削

—個別分子解析における“次の一手”の自律的探索

..... 都築 拓, 岡田裕貴, 丸山順一, 金 博奕, 小澤陽介, 袖木克之 51 (635)

7. 希少疾患の創薬標的分子を予測するAI技術

—ゲノムとトランスクリプトームの融合が拓く新しい治療戦略

..... 難波里子, 山西芳裕 60 (644)

8. 医療データを用いた治療標的分子探索

..... 酒井貴史 69 (653)

第2章 医薬品候補分子の探索と最適化

I. 探索研究

1. 深層学習を用いた化合物-タンパク質間相互作用予測 富井健太郎 76 (660)
2. 構造化データ検索とLLMの融合
一次世代ケモインフォマティクスと創薬基盤技術への展望 田部井靖生 82 (666)
3. 多層AI解析が加速するリパーピング創薬
—GATE 技術による治療薬候補の探索 中山裕介 88 (672)

II. 生成研究

4. 生成AIで構築する化合物潜在空間
—大規模分子対応モデルによる第三のリソース設計学 榊原康文 95 (679)
5. ChemTS による分子設計の応用と発展 藤井 慧, 寺山 慧 102 (686)
6. 合成可能性を考慮した医薬品分子の構造生成モデル
..... 森本恭平, 高田慎之助, 山西芳裕, 津田宏治 108 (692)
7. データ駆動型アプローチによる Hit-to-Lead 最適化 関嶋政和 114 (698)
8. 生成AIによる化学構造の最適化
—化学構造の画像化と画像キャプション技術による最適化戦略 吉森篤史 122 (706)
9. トランスクリプトームからの医薬品化合物の構造生成
..... 松清優樹, 山中知茂, 山西芳裕 129 (713)
10. データ駆動型最適化が変える mRNA ワクチン設計
—機械学習と数理的探索・最適化による配列空間の理解と創薬応用
..... 伊莉久裕, 川上英良 135 (719)
11. マルチタスク学習による MHC クラス II ネオアンチゲン結合予測
—データ駆動型アプローチによるがんワクチン開発の加速
..... 一久和弘, 二階堂愛 141 (725)
12. タンパク質言語モデルを活用した創薬研究
..... 大谷悠喜, 藤原嵩士, 清水秀幸 146 (730)

第3章 医薬品候補分子の作用機序の解明と評価

I. 作用機序, メカニズム解明

1. トランスクリプトーム計測技術の進展とがん薬物応答
芳賀泰彦, 鈴木絢子, 鈴木 穰 153 (737)
2. メトホルミン作用のオリエント急行仮説
 —トランスオミクス解析によるデータ駆動型の作用機序解明
幡野 敦, 柚木克之 159 (743)
3. 分子からシステムへ: マルチオミクス×AIで健康評価 渡邊謙吾 169 (753)

II. 候補分子の評価

4. 1細胞レベルでの遺伝子発現の予測と創薬応用 岩田通夫 176 (760)
5. 全タンパク質構造への薬の結合親和性から効能と副作用を予測
 —シミュレーションとAI・機械学習で薬のメカニズムを理解する
澤田隆介, 坂尻由子 183 (767)
6. 機械学習による薬物動態予測 江崎剛史 190 (774)
7. 動物実験代替法に関連する数理的手法
 —統計的測定精度評価と毒性試験データベースの構築・活用 竹下潤一 196 (780)

第4章 国内外の動向

I. 国内のAI創薬プロジェクトの概要と展望

1. **Short Article** 科学研究基盤モデル開発プログラム AGIS
 —理化学研究所のAI for Science研究プログラム 泰地真弘人 203 (787)
2. **Short Article** 産学連携による創薬AIプラットフォームの開発 (AMED DAIIA)
 本間光貴 207 (791)
3. **Short Article** PRISM (官民研究開発投資拡大プログラム)
 —データ駆動的創薬標的探索をめざして 夏目やよい 210 (794)
4. **Short Article** 毒性発現メカニズムに基づく化学物質の毒性予測システム AI-SHIPS
 船津公人 213 (797)

II. 製薬会社の創薬における AI 活用の取り組み

- 5. Short Article 第一三共における AI, インフォマティクスの活用**
 —データ駆動型創薬 (D4) のこれまでとこれから…………… 芹沢貴之 217 (801)
- 6. Short Article 小野薬品における AI を活用した創薬…………… 江頭 啓 221 (805)**
- 7. Short Article アステラス製薬の医薬品分子設計への AI 活用…………… 森 健一 225 (809)**
- 8. Short Article 抗体医薬品設計における機械学習技術の展開**
 —中外製薬…………… 寺本礼仁 229 (813)
- 9. グローバル投資家の視点から見る AI 創薬変革の最前線**
 …………… 芦田広樹, 鈴木ゆりあ 233 (817)
- 索引…………… 240 (824)**