

第5回 FUJITA ブレインサイエンスセミナー

(精神・神経病態解明センター開催)

予測AI、生成AIと量子化学シミュレーションを用いた医薬品設計 "Drug Design Driven by AI and Quantum Chemical Simulations"



国立研究開発法人
理化学研究所

本間 光貴 先生

日時: 2026年 9月 28日 (月) 17:00 - 18:00

場所: 大学2号館7階701とZoomのハイブリット開催
※学外者はZoomのみ

言語: 日本語 (Japanese)



参加登録 URL:

https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_8s_nC4jjR9aSh55leqFIng

低分子医薬品設計では薬効・薬物動態・毒性の同時最適化が困難であり、従来のAI予測は実測データから離れた空間で精度が落ちる欠点があった。これを解決するため、AMEDのDAIIAプロジェクト（2020-2024年）では、国内製薬17社との連携により、世界的にも例のない1,500万件規模の秘匿データを連合学習させた数百項目についての活性、薬物動態、毒性の予測AIを構築した。さらに、予測モデルの適用範囲（AD）を考慮した構造生成AI（ChemTS）の開発や、高精度な立体構造・活性予測AI「Boltz-2」の活用、「富岳」を用いた量子力学（QM/FMO法）シミュレーションの融合を推進した。当日は技術開発に医薬品設計の実例を交えて紹介する。

お問い合わせ・連絡先

・講演内容について／佐野 裕美（精神・神経病態解明センター 内線：9379）
・その他／鶴田 未奈子・池田 彩乃（研究支援部 研究支援課 内線：2590）

2026 年 8 月 17 日

August 17, 2026

学生・教職員各位

To all faculty, staff, and students

藤田医科大学 精神・神経病態解明センター

名誉センター長 貝淵弘三

令和 8 年度

第 5 回 FUJITA ブレインサイエンスセミナー 開催通知 Information on FUJITA Brain Science Seminar 2026

◆ 演者：本間 光貴 先生（国立研究開発法人理化学研究所）

「予測 AI、生成 AI と量子化学シミュレーションを用いた医薬品設計」

Teruki Honma (RIKEN)

- Drug Design Driven by AI and Quantum Chemical Simulations -

日時: 2026 年 9 月 28 日 (月) 17:00 - 18:00

Time and Date: Monday, September 28, 2026, 17:00-18:00

場所: 大学 2 号館 7 階 701 とオンライン (Zoom) のハイブリッド開催

※学外者はオンライン (Zoom) のみ

Room: University personnel can attend the seminar at 701, 7F, Building No.2 and online Zoom. Others can attend it online (Zoom).

受講対象者: 学内外にかかわらず、どなたでもご参加いただけますが、生命科学について大学学部生程度以上の知識をお持ちであることが望ましいです。

参加方法: オンラインでご参加の方は、下記サイトより必ず事前登録してください。

このミーティングに事前登録する:

https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_8s_nC4jjR9aSh55leqFIng

登録後、ミーティング参加に関する情報の確認メールが届きます。

使用言語: 日本語

Language: Japanese

講演要旨: 低分子医薬品設計では薬効・薬物動態・毒性の同時最適化が困難であり、従来の AI 予測は実測データから離れた空間で精度が落ちる欠点があった。これを解決するため、AMED の DAIIA プロジェクト (2020-2024 年) では、国内製薬 17 社との連携により、世界的にも例のない 1,500 万件規模の秘匿データを連合学習させた数百項目についての活性、薬物動態、毒性の予測 AI を構築した。さらに、予測モデルの適用範囲 (AD) を考慮した構造生成 AI (ChemTS) の開発や、高精度な立体構造・活性予測 AI 「Boltz-2」の活用、「富岳」を用いた量子力学 (QM/FMO 法) シミュレーションの融合を推進した。当日は技術開発に医薬品設計の実例を交えて紹介する。

担当者連絡先:

- ・講演内容に関して: 佐野 裕美 (精神・神経病態解明センター 内線: 9379 メール: hiromi.sano@fujita-hu.ac.jp)
- ・その他: 鶴田 未奈子・池田 彩乃 (研究支援部 研究支援課 内線: 2590 メール: icbs@fujita-hu.ac.jp)