

実験医学 増刊

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見た 新時代の創薬戦略

編集／柚木克之(理化学研究所生命医科学研究センター統合細胞システム研究チーム)
山西芳裕(名古屋大学大学院情報学研究科複雑系科学専攻生命情報論講座)

関連キーワード

各種オミクス技術（特にRNA-seq, メタボローム），シングルセル解析，化合物データベース，
化合物ライブラリ，AI，クラウド，創薬支援サービス

網羅的計測技術やAI・機械学習技術の急速な進展により、データ駆動・AI駆動型の創薬・薬理関連研究が国際的に大きく進展しつつあります。

例えば網羅的計測技術、とくにオミクス関連技術の進歩により既存薬の標的分子が従来知られていた古典的標的以外にも多数存在する可能性を示した例があり、AI・機械学習技術はリード化合物の最適化など分子設計に応用されています。

本増刊号では、独自の強みを日本から発信しているアカデミア・企業の両方の研究者にお声掛けし、データ駆動・AI駆動型の創薬・薬理研究の最新成果を俯瞰するとともに今後の技術革新を展望したいと考えています。

本号の出稿ポイント

❖ 次世代のAI創薬を担う研究者の卵が読者として想定されます

ぜひ、AI創薬における貴社の強みをぜひアピールください

❖ オミクスや大規模解析，データベースなど，AI創薬に不可欠な貴社製品・サービスもぜひご紹介ください

序にかえて

柚木克之(理化学研究所), 山西芳裕(名古屋大学)

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 長田裕之(微生物化学研究所)
- 2) 熱プロテオームプロファイリングによる標的タンパク質同定 幡野 敦、松本雅記(新潟大学)
- 3) LIP-MS による標的タンパク質・部位・構造の探索 小形公亮、石濱 泰(京都大学)
- 4) メタボローム解析によるマーカー探索 三枝大輔(帝京大学)
- 5) マルチスケール解析法による創薬研究 村田昌之(東京科学大学)
- 6) 転写制御ネットワークの構造に基づく細胞老化原因遺伝子の探索 都築 拓(エピストラ株式会社)
- 7) GWAS と TWAS による治療標的分子探索 難波里子(名古屋大学)
- 8) 医療データを用いた治療標的分子探索 酒井貴史(大分大学)

第2章 医薬品候補化合物の探索と最適化

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(産業技術総合研究所)
- 2) データ圧縮技術を活用した化合物検索や化合物・タンパク質間相互作用予測 田部井靖生(理化学研究所)
- 3) GNN を活用した多層的アプローチによる COVID-19 治療薬候補の探索 中山裕介(株式会社ジェクスヴァル)

II, 生成研究

- 4) 機械学習(ベイズ最適化)を用いた mRNA ワクチンの設計 川上英良(理化学研究所/千葉大学)
- 5) 抗菌ペプチドの生成 AI 清水秀幸(東京科学大学)
- 6) hit-to-lead 化合物構造最適化 関嶋政和(東京科学大学)
- 7) 天然化合物の生成 AI 榊原康文(北里大学)
- 8) ChemTS による化合物構造生成 寺山 慧(横浜市立大学)
- 9) CasVAE による化合物構造生成 森本恭平、山西芳裕(名古屋大学)、津田宏治(東京大学)
- 10) トランスクリプトームからの化合物構造生成 松清優樹(名古屋大学)

11) 生成 AI による化学構造最適化

吉森篤史(株式会社理論創薬研究所)

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) 薬物応答マルチオミクス基盤モデルの構築 二階堂愛(理化学研究所)
- 2) 薬物応答のトランスクリプトーム計測 鈴木 穰(東京大学)
- 3) トランスオミクス解析による2型糖尿病薬メトホルミンの作用機序解明 幡野 敦(新潟大学)、柚木克之(理化学研究所)
- 4) 肥満の血液マルチオミクス解析 渡邊謙吾(徳島大学)

II, 候補分子の評価

- 5) 薬物応答シングルセルトランスクリプトームデータ解析 岩田通夫(九州工業大学)
- 6) AlphaFold を活用した副作用予測 澤田隆介(岡山大学)
- 7) 機械学習による薬物動態予測 江崎剛史(滋賀大学)
- 8) 機械学習を活用した化合物の毒性予測 竹下潤一(産業技術総合研究所)

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) AGIS [short article] 執筆者未定
- 2) DAIIA [short article] 本間光貴(理化学研究所)
- 3) PRISM [short article] 夏目やよい(医薬基盤・健康・栄養研究所)
- 4) AI-SHIPS [short article] 船津公人(奈良先端科学技術大学院大学)

II, 製薬会社の創薬における AI 活用の取り組み

- 5) 第一三共 [short article] 芹沢貴之(第一三共株式会社)
- 6) 小野薬品工業 [short article] 江頭 啓(小野薬品工業株式会社)
- 7) アステラス [short article] 森 健一(アステラス製薬株式会社)
- 8) 中外製薬 [short article] 太田 淳、寺本礼仁(中外製薬株式会社)
- 9) ベンチャーなどの動向 芦田広樹(Eight Roads Ventures Japan)

- お申込・お問い合わせ**

雑誌・書籍広告 掲載申込書

以下 もしくは [こちら \(docxファイル\)](#) へご記入のうえ、PDF形式ファイルでご送付ください

下記の通り、広告掲載を申し込みします。

申込日	年 月 日
掲載雑誌・書籍名	実験医学増刊 Vol. 44 No. 5「AI・データ駆動型創薬研究」
貴社名	
電話番号	
ファックス番号	
郵便番号・所在地・建物名	〒
ご担当者名	
ご所属	
電子メールアドレス	
掲載する広告内容	※具体的にご記載ください。可能であればウェブサイトURLもお示しください
掲載場所・刷り色	
掲載ページ数	
掲載料金	
お支払方法	
支払日	
実験医学・羊土社書籍への広告掲載について	☐ はじめて掲載する ☐ 過去に掲載したことがある ☐ 過去に掲載したか不明 ※当てはまるものをご選択ください
備考	

【ご注意事項】

- 広告原稿の仕様（スケジュール・サイズ・原稿製作のご注意点など）は、別紙企画書・要項等をご参照ください
- 広告審査・広告内容に関して：①お申込時、②広告原稿入稿時に広告審査がございます（広告内容によって原稿修正あるいは掲載お見送りいただく場合がございます）

【お申込・お問い合わせ先】

【発行元】

株式会社 羊土社 企画営業推進部（担当：丸山）

〒101-0052東京都千代田区神田小川町2-5-1

TEL: 03-5282-1211 FAX: 03-5282-1212 E-Mail: promo@yodosha.co.jp

【広告総代理店】

株式会社 エー・イー企画

〒532-0003 大阪市淀川区宮原2-14-14 新大阪グランドビル6F（大阪オフィス）

TEL: 06-6350-7162 FAX: 06-6350-7164 E-mail: adinfo@aepi.jp