

創薬DXにおけるAIの活用と展望

講師：小島 諒介 氏

京都大学医学研究科 准教授・理化学研究所 BDR チームディレクター

創薬分野では、AI技術とシミュレーション技術の融合による「創薬DX（デジタルトランスフォーメーション）」が急速に進展しています。近年、ディープラーニングを活用した分子構造生成モデルや分子動力学シミュレーションの高精度化に加え、大規模言語モデル（LLM）や ChatGPT の登場によって、研究情報の解析や創薬知識の自動抽出が可能になるなど、創薬研究のアプローチが大きく変化しています。また、AlphaFold に代表されるタンパク質構造予測 AI の進化により、これまで困難であった標的構造解析や候補化合物探索が飛躍的に効率化されています。

本講演では、AI とシミュレーションを組み合わせた創薬支援の最新動向を紹介するとともに、候補化合物探索から薬効・副作用予測、構造最適化までのプロセスにおけるデジタル技術の活用法を具体的に解説します。また、国内外における成功事例を交え、創薬DXを推進する上での課題と今後の展望についても議論します。聴講者には、AI・シミュレーション技術をどのように自社の創薬研究に導入し、研究開発の高度化・効率化を実現するかの道筋を理解していただけます。

【講師経歴】2014年：東京工業大学大学院 情報理工学研究科 計算工学専攻 修士課程修了、2017年：東京工業大学大学院 情報理工学研究科 情報環境学専攻 博士課程修了、博士(工学)、2017年：京都大学医学研究科 大学院医学研究科人間健康科学系専攻 ビッグデータ医科学分野、特定助教、2021年：京都大学医学研究科 大学院医学研究科人間健康科学系専攻、講師、2024年：京都大学医学研究科 医学研究科附属医療DX教育研究センター、准教授(兼)京都大学医学研究科 大学院医学研究科人間健康科学系専攻バイオメディカルデータサイエンス分野(兼)理化学研究所 生命機能科学研究センター(BDR)マルチモーダルAI基盤技術研究チーム、チームディレクター

開催日時	2026年1月22日(木) 13:30~16:30	※本セミナーは、当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。 ※見逃し配信付
受講料	44,000円(税込) ※資料(PDF)・見逃し配信付 *メルマガ登録者 39,600円(税込) *アカデミック価格 26,400円(税込)	推奨環境は当該ツールをご参照ください。後日、視聴用のURLを別途メールにてご連絡いたします。 詳細は裏面をご覧ください。 ★受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします。

*アカデミック価格：学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。
★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込かつ申込者全員がメルマガ会員登録していただいた場合、1名あたりの参加費がメルマガ会員価格の半額となります。★【セミナー対象者】・創薬DXを推進する研究企画・IT部門の担当者・製薬企業、化学企業においてAI技術やシミュレーション技術を創薬に活用したい研究者、開発者、機械学習や分子モデリングの実務応用を検討している方・その他研究機関でAI創薬、計算化学、バイオインフォマティクスに関心を持つ研究者 ★【得られる知識】・AIおよびシミュレーションを用いた創薬プロセスの全体像と活用事例・分子設計、薬物動態予測、標的構造解析などへのAI応用の最新手法・創薬DXの導入における実務的な課題とその解決の方向性・AIモデルとシミュレーションを連携させた研究開発ワークフローの設計指針

【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

1.創薬DXの現状と創薬プロセスにおけるAIの位置づけ 1.1 創薬DXが注目される背景：開発コスト・期間・成功率の課題 1.2 創薬プロセス全体の俯瞰：ターゲット探索から臨床試験まで 1.3 各段階におけるAI・シミュレーション技術の貢献領域 1.4 (実験中心からデータ駆動型創薬へのパラダイムシフト)	2.4 知識グラフやネットワーク技術を活用したターゲット探索 2.5 オミクスデータ解析からのターゲット探索 3.ヒット化合物探索・リード探索・最適化におけるAIの活用 3.1 化合物設計・最適化プロセスにおけるAIの役割 3.2 目標特性を考慮した分子設計と探索の自動化 3.3 構造予測を活用した活性評価と最適化支援(例：標的構造解明、リガンド結合部位推定、相互作用モデリング) 3.4 リード化合物探索におけるAI応用事例と成果 4.前臨床研究におけるAIとシミュレーションの活用と評価精度の向上 4.1 物性予測・薬効評価・安全性評価にお	けるAI活用 4.2 薬物動態・副作用予測におけるAI活用 4.3 合成経路や反応機構解析におけるAI活用 4.4 AIとシミュレーションを組み合わせた反応性・安定性評価 5.臨床・市販後研究におけるリアルワールドデータ活用と創薬DXの推進 5.1 リアルワールドデータの概要と情報源(電子カルテ・レセプト・ウェアラブル等) 5.2 AIによる臨床データからの情報抽出例 5.3 市販後データ解析例 6.創薬DXの実践事例と今後の展望 6.1 連合学習によるデータ共有・解析基盤 6.2 基盤モデル・生成AI・マルチモーダルAIによる研究開発の革新 6.3 AIによる自律型創薬の実現可能性 6.4 創薬DXの今後の展開と将来に向けた課題・展望
---	---	--

弊社記入欄		セミナー申込書 ※見逃し配信付			
セミナー名		創薬DXにおけるAIの活用と展望			
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、登録希望の場合は○↓		会社名(団体名) 住所〒		TEL : FAX : E-mail :	
会員登録済み	新規登録希望	部署	役職	氏名	
お支払方法		銀行振込・その他		お支払予定	2026年 月 日頃

■申込方法：セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail(order_7053@cmcre.com)でお申し込みください。
■セミナーお申込み後のキャンセルは基本的にお受けしておりません、ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。
■申込先：(株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町 2-7 TEL03-3293-7053
■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ <https://cmcre.com>

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789

2026 年 1 月 22 日（木）開催

創薬 DX における AI の活用と展望

講師：小島 諒介 氏

京都大学医学研究科 准教授・理化学研究所 BDR チームディレクター

**当該セミナーは、ライブ配信のウェビナー（オンラインセミナー）
見逃し配信付です！**

【ライブ配信対応セミナー】

- 本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。
お申し込み前に、下記 URL より視聴環境をご確認ください。
→ <https://zoom.us/test>
- 当日はリアルタイムで講師へのご質問も可能です。
- タブレットやスマートフォンでも視聴できます。
- お手元の PC 等にカメラ、マイク等がなくてもご視聴いただけます。この場合、音声での質問はできませんが、チャット機能、Q&A 機能はご利用いただけます。
- ただし、セミナー中の質問形式や講師との個別のやり取りは講師の判断によります。ご了承ください。
- 「Zoom」についてはこちら↓をご参照ください。
<https://zoom.us/jp-jp/meetings.html>

【お申し込み後の流れ】

- 開催前日までに、ウェビナー事前登録用のメールをお送りいたします。お手数ですがお名前とメールアドレスのご登録をお願いいたします。
- 事前登録完了後、ウェビナー参加用 URL をお送りいたします。
- セミナー開催日時に、参加用 URL よりログインいただき、ご視聴ください。
- 講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布いたしますが、参加者のみのご利用に限定いたします。他の方への転送、WEB への掲載などは固く禁じます。
- 資料を冊子で配布する場合は、事前にご登録のご住所に発送いたします。開催日時に間に合わない場合には、後日お送りするなどの方法で対応いたします。

【注意事項】

- 本セミナーの受講にあたっての推奨環境は「Zoom」に依存します。受講者の方のお手元の PC などの設定や通信環境が受信の状況に大きく影響いたしますので、ご自分の環境が対応しているか、お申し込み前の確認をお勧めいたします。

<https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC->

[MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6](https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC-MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6)

- Zoom クライアントは最新版にアップデートして使用してください。
- インターネット経由でのライブ中継ですので、回線状態などにより、画像や音声が乱れる場合があります。また、状況によっては、講義を中断し、再接続して再開する場合がありますが、予めご了承ください。
- 万が一、当社や講師側（開催側）のインターネット回線状況や設備機材の不具合により、開催を中止した場合には、受講料の返金や、状況により後日録画を提供すること等で対応させていただきます。
- 本セミナーはお申し込みいただいた方のみ受講いただけます。
- 複数端末から同時に視聴することや複数人での視聴は禁止いたします。
- 受講中の録音・撮影等は固く禁じます。
- Zoom のグループにパスワードを設定しています。お申込者以外の参加を防ぐため、パスワードを外部に漏洩しないでください。万が一一部外者が侵入した場合は管理者側で部外者の退出あるいはセミナーを終了いたします。

【見逃し配信】

- 当該ウェビナーにお申込みいただいた場合には、サービスとして ZOOM を使用した「見逃し配信」を合わせて提供いたします。
- 見逃し配信では、ウェビナーの録画動画を一定期間視聴可能です。
- ウェビナーを復習したい方、当日の受講が難しい方、期間内であれば動画を何度も視聴可能です。
- 原則、遅くとも開催 4 営業日後までに録画動画の配信を開始します（一部、編集加工します）。
- 視聴期間はウェビナー開催日から 4 営業日後を起点に 1 週間となります。
ex) 8/2（金）開催 → 8/9（金）までに配信開始 → 8/16（金）まで視聴可能
※お申込みいただいたメールアドレスに、視聴用 URL・パスワードを送付します。配信開始日を過ぎてもメールが届かない場合は弊社までご連絡ください。
※配信は準備ができ次第行いますので、開始日が早まる可能性もございます。その場合でも終了日は変わりません。
上記例の場合、8/6（火）から開始となっても 8/16 まで視聴可能です。
※原則、配信期間の延長はいたしません。
ただし、GW や年末年始・お盆期間等を挟む場合は、それに応じて弊社の標準配信期間設定を延長します。

※万一、見逃し視聴の提供ができなくなった場合でも、当該ウェビナーの価格に変更はありません。お詫びといたしまして、次回弊社セミナー／ウェビナーをお申し込みの際、5%割引させていただきます。（メルマガ会員価格でもその価格からさらに 5%引）