

Seminar Program

NVIDIA AI Colloquium

8.26 FRI @ Auditorium

13:00-13:15

Opening Remarks + NVIDIAのヘルスケアへの取り組み

NVIDIA合同会社 エンタープライズ事業本部 事業本部長 **井崎 武士**

NVIDIAはグラフィックスのみならず、2006年のCUDA登場以降のHPCアプリケーションや画像処理アルゴリズムの高速化、2012年のディープラーニング登場以降のAIの活用を通じて常にヘルスケアへの投資を続けてきています。本セッションではNVIDIAが展開するヘルスケア向けのアプリケーションプラットフォームCLARAの全体像をご紹介します。

13:15-13:40

AIが加速する創薬・生命科学

東京工業大学 情報理工学院 **大上 雅史** 先生

AlphaFold2の登場から1年が経った。世間を沸かせたAIによるタンパク質立体構造予測技術は、今ではあたりまえのように生命科学や創薬分野の研究開発に活用されている。自然言語処理分野で発展した基盤モデルによるAlphaFold2を超える構造予測AIの展開など、白熱する創薬・生命科学分野のAI研究(の一端)を紹介したい。

13:40-14:00

田辺三菱製薬における創薬AIの取り組み

田辺三菱製薬株式会社 創薬本部 創薬基盤研究所 グループマネジャー **鳥本 奈緒** 様

弊社において、主としてヒット取得から化合物最適化ステージで活用している計算化学アプローチについてご紹介します。

14:00-14:20

ADME予測モデル構築における機械学習と生理学的アプローチの比較検討

武田薬品工業株式会社 薬物動態研究所・主席研究員 **小杉 洋平** 様

データベースに存在するビッグデータを有効活用するために、機械学習を用いたADMEパラメータ予測が着目されている。一方で、従来から使われているin vitroデータを活用した生理学的モデルによるin vivoパラメータ予測との比較検討に関する報告は少なく、両者の予測精度を直接比較することが難しい。本発表では、両アプローチの比較検討を含めた社内での機械学習の取り組みについて報告する。

14:30-14:50

画像解析AI「IMACEL(イマセル)」が支援する創薬研究DX

エルピクセル株式会社 最高技術責任者(CTO) **袴田 和巳** 様

LPIXELは、ライフサイエンス領域における画像解析の知見を活かした創薬AI「IMACEL(イマセル)」を提供しています。近年では、新薬開発のコストや期間の増大等の課題を解決するとともに、従来では成し得なかった新たな価値の創出が、DXに対して求められています。IMACELの活用可能性、提供する新しい価値について、実際のIMACELの実装事例を踏まえてご紹介します。

14:50-15:10

AI創薬最新動向、Elixが持つ技術及び活用事例の紹介

株式会社Elix CEO **結城 伸哉** 様

本講演では、AI創薬最新動向を踏まえつつ、AI創薬プラットフォームElix Discovery™を中心に化合物プロファイル予測から構造発生までElixが保有する最先端技術を紹介する。これら技術を活用した最新事例の紹介も併せて行う。

15:10-15:40

地に足がついたAI創薬と未来への展望 パネルディスカッション

モデレーター:NVIDIA合同会社 山田泰永

パネリスト:田辺三菱製薬株式会社 鳥本 奈緒 様 / 武田薬品工業株式会社 小杉 洋平 様
エルピクセル株式会社 袴田 和巳 様 / 株式会社Elix 結城 伸哉 様

15:50-16:10

大規模計算を実用化するAI

~Ultra Large Virtual Screeningや結合自由エネルギー計算でのアプローチとアイデア~

株式会社ゼウレカ 研究開発部・Product Engineering Manager **牧口 大旭** 様

近年注目される、HitDiscoveryのフェーズにおけるbillionスケールの仮想化合物ライブラリを用いたスクリーニング。ゼウレカではこの超大規模ライブラリを用いたVSを低コスト・高精度に行い、絞り込んだ化合物の調達・Assayまでワンパッケージにしたサービスの開発を進めている。ライブラリサイズに比例して肥大化する計算コストをAIにより実用できるレベルまでコストを低減させるなどの実装を行っており、その事例や今後の展開などを紹介する。

16:10-16:30

富士フィルムのAI技術「REiLI」を活用した医療ITの取組み

富士フィルム株式会社 メディカルシステム事業部・ITソリューション部 統括マネージャー **成行 書史** 様

当社は2018年よりAI技術ブランド「REiLI」を立上げ、各種診断領域の支援機能の開発~社会実装を推進している。これまで、CT/MR/X線などの放射線画像に関する診断支援機能、超音波、内視鏡などの検査をリアルタイムで支援する機能、レポート作成を支援する機能など各種機能の開発してきている。本セッションでは、創薬・治験・投薬治療など医薬との接点を通じた、医療現場への新たなアウトカムの可能性などを議論したい。

16:30-16:50

テルモが進めるカテーテル治療支援AI

テルモ株式会社 心臓血管カンパニー TIS事業 R&D部・チームリーダー **関 悠介** 様

テルモは2021年12月、創立100年の節目に5か年成長戦略として「デバイスからソリューションへ」というビジョンを掲げました。特にデジタルソリューションは注力領域の3本柱の1つであり、デジタル技術を駆使して医療に貢献することを目指しています。本講演では、テルモが取り組むデジタルソリューションの1例として、菊名記念病院と共同研究を進めているカテーテル治療支援AIについてご紹介します。

16:50-17:10

実験自動最適化サービスによるライフサイエンス研究の加速

エピストラ株式会社 CEO **小澤 陽介** 様

エピストラはバイオ産業の開発・生産プロセスで用いられる実験条件の自動最適化サービス(Epistra Accelerate)を提供しています。既に大手製薬会社を含む複数の企業への導入実績もあり、理研との共同研究では、網膜色素上皮細胞への分化効率を20%以上向上させることに成功し、国際論文誌eLifeに採択されています。サービスの活用事例や今後の取組(島津製作所様との共同開発)について、ご紹介します。

17:10-18:00

Applying AI to drug design

AstraZeneca Molecular AI / Senior Director **Ola Engkvist** 様

Artificial Intelligence has become impactful during the last few years in chemistry and the life sciences, pushing the scientific boundaries forward as exemplified by the recent success of AlphaFold2. In this talk I will provide an overview of how AI have impacted drug design in the last few years, where we are now and what progress we can reasonably expect in the coming years. The presentation will have a focus on deep learning based molecular de novo design, however, also aspects of synthesis prediction, molecular property predictions and chemistry automation will be covered.