



# NIHS特別講演会（殿町#30）

## 演題

## AIによる蛋白医薬設計と安全性

### 講師

白井 宏樹 先生

理化学研究所・計算科学研究センター  
「富岳」Society5.0推進拠点・コーディネーター



### ご略歴

1989年 大阪大学大学院薬学研究科修士課程修了後、田辺製薬・アステラス製薬でインシリコ創薬研究。

2000年-01年 田辺製薬時代にCambridge大学生化学部門留学

2013年 アステラス製薬時代に抗体構造予測の世界コンペ (AMAI ; ロサンゼルス)で最良成績

2011年-14年 英国中心に抗体インフォマティクスの国際産学連携を牽引

2012年-21年 アステラス製薬専任理事

2022年4月より現職。

薬学博士、薬剤師。

現在熊本大学薬学部客員教授、筑波大学大学院講師、株式会社エヌビー健康研究所サイエンスアドバイザー、日本蛋白質科学会副会長を兼務。

### 要旨

高度な機能を持ち誰でも簡単に利用できるAIが続々と登場する時代を迎えている。また「富岳」をはじめとするスパコンの整備も進み、ここで行われる物理シミュレーションは、AIを補完するもう一つのサイバー空間技術であり、またAIに供するBig Data産生手段としても期待されている。

さて、2021年度、売上高100億ドル超の9つの医薬品のうち、3つが抗体医薬品、2つが半抗体医薬品である。そして昨今、この分野に重要な技術として登場したのもAI特に深層学習であり、望みの機能や物性を持った抗体配列を自動生成してくれる。

これらAIが発生する抗体について、安全性という観点も含めて現状と問題点を整理し、皆様とともに将来を展望したい。当日は、AIやインシリコ技術、また抗体について初学者でいらっしゃる方々にもご理解いただけるように、解説させて頂きたい。

### 日時

2023年3月9日（木）

15：30～17：00 ハイブリッド開催

会議室：国立医薬品食品衛生研究所 2階 共用会議室  
オンライン：WebEx

【参加申し込み】 <https://nihs-aflex2.webex.com/weblink/register/rdc0bc294fc624bdce2cff16c0cab9d87> からご登録をお願い致します。（締め切り 3月7日）

- ①登録後に接続情報がメール送信されます。
- ②現地参加人数が上限に達した場合は、Web参加への変更をお願いする場合がございますので、予めご了承の程、お願い申し上げます。（変更の際には、メールにてご連絡を差し上げます）

【お問い合わせ先】 国立医薬品食品衛生研究所 生物薬品部 石井明子  
電話：044-270-6512 メール：watabe@nihs.go.jp