

## ノーベル賞授賞式前日に考える：AI 変える創薬とタンパク質構造予測の最前線

東京科学大学 情報理工学院  
日本医療研究開発機構 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム (AMED BINDS)  
特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ (IPAB)  
学術変革領域研究(A) 天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く生物活性分子デザイン

### 開催趣旨

近年、人工知能 (AI) 技術の急速な進展が様々な分野において革命的な影響をもたらしています。中でも、2024 年のノーベル物理学賞および化学賞のダブル受賞の報告は、AI 技術が科学技術全般に及ぼす影響の重要性を改めて強調しました。特にノーベル化学賞では、タンパク質の立体構造予測およびデザイン技術への AI の活用が取り上げられました。この受賞は、AI 技術が科学の前進を加速し、私たちの生活に密接に関わる新たな知見や技術を提供していることを象徴しています。

本シンポジウム「ノーベル賞授賞式前日に考える：AI 変える創薬とタンパク質構造予測の最前線」では、AI と生命科学の融合に焦点を当て、特に AI を活用したタンパク質の立体構造予測やタンパク質デザインについて深く掘り下げます。2020 年に公開されたタンパク質構造予測プログラム AlphaFold の登場により、アミノ酸配列から立体構造を予測する技術が飛躍的に向上しました。創薬プロセスの効率化に大きな影響を及ぼし、病気のメカニズム解明や新薬開発の加速に貢献しています。

本シンポジウムでは、AI を用いた構造予測の歴史や意義、構造生物学者からみた期待、最新の予測手法やその応用、さらに今後の展望について、国内外の研究者をお招きし、議論を深めてまいります。また、AI が持つ可能性とともに、その限界や倫理的課題についても検討し、未来の科学技術のあり方を探求します。

AI がもたらす新しい科学の未来を見据え、生命科学や創薬研究の最前線で何が起きているのか、ぜひご参加いただき、皆様と共有できることを心から期待しております。

## ノーベル賞授賞式前日に考える：AIが変える創薬とタンパク質構造予測の最前線 シンポジウム

日時 2024年12月9日(月) 13:00開場、13:30開会

会場 東京科学大学 大岡山キャンパス レクチャーシアター (大岡山西講義棟1)

事前参加登録制 こちらからお申し込み下さい <https://forms.gle/TERgcAuaNSASJ7co6>

### プログラム

- 13:30~13:35 開会挨拶  
宮崎 純 (東京科学大学 情報理工学院長)
- 13:35~13:45 開催趣旨説明  
関嶋 政和 (東京科学大学 情報理工学院)
- 13:45~14:20 AlphaFoldとはなんだったのか?  
大上 雅史 (東京科学大学 情報理工学院)
- 14:20~14:55 構造予測の来し方行く末  
富井 健太郎 (産業技術総合研究所 人工知能研究センター)
- 14:55~15:30 タンパク質構造予測とクライオ電子顕微鏡による Visual Proteomics  
吉川 雅英 (東京大学 大学院医学系研究科)
- 休憩
- 15:45~16:20 タンパク質でなにつくろう ~AI技術で加速するタンパク質デザイン~  
本田 信吾 (ワシントン大学 Institute for Protein Design) ※オンライン中継
- 16:20~16:55 予測構造と計算で酵素の機能を解明できる時代へ  
森脇 由隆 (東京科学大学 総合研究院 難治疾患研究所)
- 16:55~17:30 タンパク質-RNA複合体の立体構造予測 (仮)  
佐藤 健吾 (東京科学大学 生命理工学院)
- 17:30~17:40 閉会挨拶  
秋山 泰 (東京科学大学 情報理工学院/並列生物情報処理イニシアティブ)
- 18:00~20:00 懇親会 (大岡山キャンパス西5号館2階つばめテラス、会費5,000円)

#### お問い合わせ

東京科学大学 情報理工学院 准教授 関嶋 政和 (event2024@cbi.c.titech.ac.jp)

主催 東京科学大学 情報理工学院

共催 日本医療研究開発機構 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム (AMED BINDS)

特定非営利活動法人 並列生物情報処理イニシアティブ (IPAB)

学術変革領域研究(A) 天然物が織り成す化合物潜在空間が拓く生物活性分子デザイン

後援 特定非営利活動法人 日本バイオインフォマティクス学会 (予定)

特定非営利活動法人 情報計算法学生物学会 (CBI学会) (予定)

一般社団法人 情報処理学会 バイオ情報学研究会 (予定)

一般社団法人 情報処理学会 数理モデル化と問題解決研究会 (予定)

# アクセス

大岡山西講義棟I

