

- ◆医療ビッグデータとAI（人工知能）の融合は、創薬領域に何をもたらすのか？
革新的創薬技術の現状と課題を詳解する！
- ◆AI創薬の可能性を、大型プロジェクトをはじめ製薬メーカーの取り組みからも紐解いていく！
- ◆創薬インフォマティクス構築におけるAI（人工知能）活用についてその可能性を俯瞰する！

革新的 AI 創薬

～医療ビッグデータ、人工知能がもたらす創薬研究の未来像～

- 発行：2022年7月
- 定価：本体 50,000 円 + 税
- 体裁：B5 判 390 頁
- ISBN：
【冊子版】978-4-86043-788-6
【電子版】978-4-86043-789-3
■C3047

電子試読が
できます
(無料)
NTS サイト→



目次概略

- | | |
|--------------------------|----------------------------|
| 第1章 日本のAI創薬研究の現状 | 第5章 活用事例 |
| 第2章 化学情報学からのAI創薬の最前線 | 第6章 製薬各社におけるAI創薬の取り組み |
| 第3章 生命情報学および医療情報学からのAI創薬 | 第7章 AIベンチャー企業におけるAI創薬の取り組み |
| 第4章 AI創薬を推進する情報処理技術 | |

監修者

小長谷明彦 東京工業大学名誉教授

執筆者

(執筆順)

小長谷明彦 東京工業大学名誉教授
夏目やよい 医薬基盤・健康・栄養研究所
水口賢司 医薬基盤・健康・栄養研究所／大阪大学
荻島創一 東北大学
池口満徳 横浜市立大学／理化学研究所
福澤薫 大阪大学
加藤幸一郎 九州大学
金子弘昌 明治大学
船津公人 奈良先端科学技術大学院大学
山崎浩史 昭和薬科大学
植沢芳広 明治薬科大学
吉成浩一 静岡県立大学
庄野文章 奈良先端科学技術大学院大学
清水祐吾 慶應義塾大学
米澤朋起 慶應義塾大学
池田和由 慶應義塾大学／理化学研究所
飯田緑 九州工業大学
山西芳裕 九州工業大学
小島諒介 京都大学
水野聖士 東北大学
佐藤淳平 東京大学
合田和生 東京大学
喜連川優 東京大学
石川智基 医療経済研究・社会保険福祉協会医療経済研究機構
満武巨裕 医療経済研究・社会保険福祉協会医療経済研究機構
関嶋政和 東京工業大学
大上雅史 東京工業大学
寺山慧 横浜市立大学
荒牧英治 奈良先端科学技術大学院大学
今村恵子 京都大学／理化学研究所／T-CiRA

日高中 武田薬品工業(株)
儀我美保 東京大学／学際数学研究所
儀我美一 東京大学／学際数学研究所
井上治久 京都大学／理化学研究所／T-CiRA
加納ふみ 東京工業大学
國重莉奈 東京工業大学
山下慶子 日本電気(株)
尾上広祐 日本電気(株)
田中雄希 日本電気(株)
小野口和英 日本電気(株)
北村哲 日本電気(株)
興野悠太郎 (株)MOLCURE
上田修功 理化学研究所
林宣宏 東京工業大学
浜田道昭 早稲田大学／産業技術総合研究所／日本医科大学
宮本大輔 アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社
宇都宮聖子 アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社
大島貴弘 インフォコム(株)
森下奈央 武田薬品工業(株)
谷口孝彦 武田薬品工業(株)
齊藤隆太 田辺三菱製薬(株)
市川治 住友ファーマ(株)
吉永英史 住友ファーマ(株)
寺本礼仁 中外製薬(株)
水野英明 中外製薬(株)
Casey Galvin (株)Elix
力丸健太郎 (株)Preferred Networks
木村敏郎 (株)ワールドフュージョン
櫻井祐樹 (株)ワールドフュージョン
神谷幸太郎 SyntheticGestalt(株)

(株)エヌ・ティー・エス行 FAX:047-314-0810/E-mail: eigyo@nts-book.co.jp

冊子版()部/CD版()部 CD版:冊子版と同価格。CD-ROMにPDFを収録

購入申込書

団体名			
所在地	〒		
部署名			TEL
氏名			E-mail
通信欄			

申込要領

- 直接小社宛にメール、FAX、またはホームページにてお申し込み下さい。送料は無料です(国内に限ります)。
- お支払い方法
商品到着後、銀行振込、郵便振替にてお支払い下さい。
- お申込み先・お問い合わせ先
(株)エヌ・ティー・エス営業部
- ◆市川AIセンター
〒272-0023
千葉県市川市南八幡 4-3-3 武蔵屋ビル 4F
TEL:047-314-0801/FAX:047-314-0810
E-mail: eigyo@nts-book.co.jp

株式会社 エヌ・ティー・エス

ここに記入いただいた個人情報は、下記目的のために利用されます。

(1)お客様との契約の履行、管理 (2)新規書籍及びセミナーの紹介等、当社の営業内容の紹介 (3)お客様にとり有用と思われる当社提携先の書籍・サービス等の紹介
尚、弊社における「個人情報のお取り扱いについて」及び、「個人情報保護方針」については弊社HPをご覧ください。

第1章 日本の AI 創薬研究の現状

- 第1節 AI 創薬の可能性と普及への課題
＜小長谷 明彦＞
- 第2節 生命情報科学からの AI 創薬
＜夏目 やよい, 水口 賢司＞
- 第3節 医療ビッグデータからの AI 創薬と個別化ヘルスケア
＜荻島 創一＞

第2章 化学情報学からの AI 創薬の最前線

- 第1節 AI 創薬のための分子動力学シミュレーション法の開発
＜池口 満徳＞
- 第2節 FMO 法を活用した AI 創薬
＜福澤 薫, 加藤 幸一郎＞
- 第3節 人工知能を活用した分子設計・材料設計
＜金子 弘昌＞
- 第4節 毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト
- 第1項 AI-SHIPS プロジェクトの意義
～開発背景, 設計思想, および今後の展開について～
＜船津 公人＞
- 第2項 一般化学物質の吸収および体内動態予測手法開発
＜山崎 浩史＞
- 第3項 AI-SHIPS における一般化学物質の毒性予測モデル構築
＜植沢 芳広＞
- 第4項 AI-SHIPS 統合的毒性予測システムの開発
＜吉成 浩一＞
- 第5項 AI-SHIPS に関連する最近の国内外の *in silico* 予測手法の開発状況
＜庄野 文章＞
- 第5節 AI 創薬における適切な学習データとは？
＜清水 祐吾, 米澤 朋起, 池田 和由＞

第3章 生命情報学および医療情報学からの AI 創薬

- 第1節 新薬創出を加速する人工知能の開発
～臨床情報を活用した創薬標的探索
＜夏目 やよい＞
- 第2節 分子ネットワークを有効活用した AI 創薬手法
＜飯田 緑, 山西 芳裕＞
- 第3節 グラフニューラルネットワークを用いた医療関連データ処理
＜小島 諒介＞
- 第4節 大規模コホートデータに基づく早期疾患予測モデル
＜水野 聖士, 荻島 創一＞
- 第5節 地域のレセプト情報に基づく介護需要将来推定
＜佐藤 淳平, 合田 和生, 喜連川 優, 石川 智基, 満武 巨裕＞

第4章 AI 創薬を推進する情報処理技術

- 第1節 AI 創薬アルゴリズム
＜関嶋 政和＞
- 第2節 AlphaFold2 の登場と創薬への影響
＜大上 雅史＞
- 第3節 AI 創薬向け機械学習・最適化手法の開発
＜寺山 慧＞
- 第4節 医療言語処理の現状と今後の展望
＜荒牧 英治＞
- 第5節 熱拡散方程式 (HDE) モデルによる新薬探索支援 AI ツールの開発
＜今村 恵子, 日高 中, 儀我 美保, 儀我 美一, 井上 治久＞
- 第6節 共変動ネットワーク解析法とリシール細胞技術を基盤とする AI 主導の創薬・細胞医薬支援プラットフォーム創成
＜加納 ふみ, 國重 莉奈＞

第5章 活用事例

- 第1節 AI を用いたネオアンチゲン予測システムによる個別化がんワクチン TG4050 の開発
＜山下 慶子, 尾上 広祐, 田中 雄希, 小野口 和英, 北村 哲＞
- 第2節 AI-ロボット駆動型科学による中・高分子医薬品設計
＜興野 悠太郎＞
- 第3節 サブセット・バインディングによる患者層別化 AI の開発
＜上田 修功, 夏目 やよい＞
- 第4節 AI プロテオミクスによる診断, 治療, 創薬支援
＜林 宣宏＞
- 第5節 RNA 情報科学・AI 技術を融合した AI アプタマー創薬技術の開発
＜浜田 道昭＞
- 第6節 創薬における HPC, 機械学習, 量子コンピュータでのクラウド活用
＜宮本 大輔, 宇都宮 聖子＞
- 第7節 機械学習自動化パッケージの開発と AI 創薬への適用事例
＜大島 貴弘＞

第6章 製薬各社における AI 創薬の取り組み

- 第1節 武田薬品工業における AI 創薬の取り組み
＜森下 奈央, 谷口 孝彦＞
- 第2節 田辺三菱製薬におけるデータ駆動型創薬の取り組み
＜齊藤 隆太＞
- 第3節 住友ファーマ株式会社における AI 創薬の取り組み
＜市川 治, 吉永 英史＞
- 第4節 中外製薬における AI 創薬の取り組み
＜寺本 礼仁, 水野 英明＞

第7章 AI ベンチャー企業における AI 創薬の取り組み

- 第1節 Elix における AI 創薬
＜Casey Galvin＞
- 第2節 Preferred Networks における AI 創薬
＜力丸 健太郎＞
- 第3節 ワールドフュージョン社における AI 創薬
＜木村 敏郎, 櫻井 祐樹＞
- 第4節 SyntheticGestalt 社における AI 創薬
＜神谷 幸太郎＞

※ 本書に記載されている会社名, 製品名, サービス名は各社の登録商標または商標です。
なお, 必ずしも商標表示 (®) 付記していません。

関連書籍のご案内

No.	図書名	発刊年	頁数	本体価格	CD版※	電子試読
1	プレシジョン・メディシン ～ビッグデータの構築・分析から臨床応用・課題まで～	2018	406	46,000円	○	○
2	スマート医療テクノロジー ～AI、ビッグデータの利活用による次世代手術システムと医療経営～	2019	368	53,000円	○	○
3	医用工学ハンドブック	2022	544	28,000円	○	○
4	人と共生するAI革命 ～活用事例からみる生活・産業・社会の未来展望～	2019	480	48,000円	○	○
5	データ駆動型材料開発 ～オントロジーとマイニング、計測と実験装置の自動制御～	2021	290	52,000円	○	○

※CD 版も同価格