

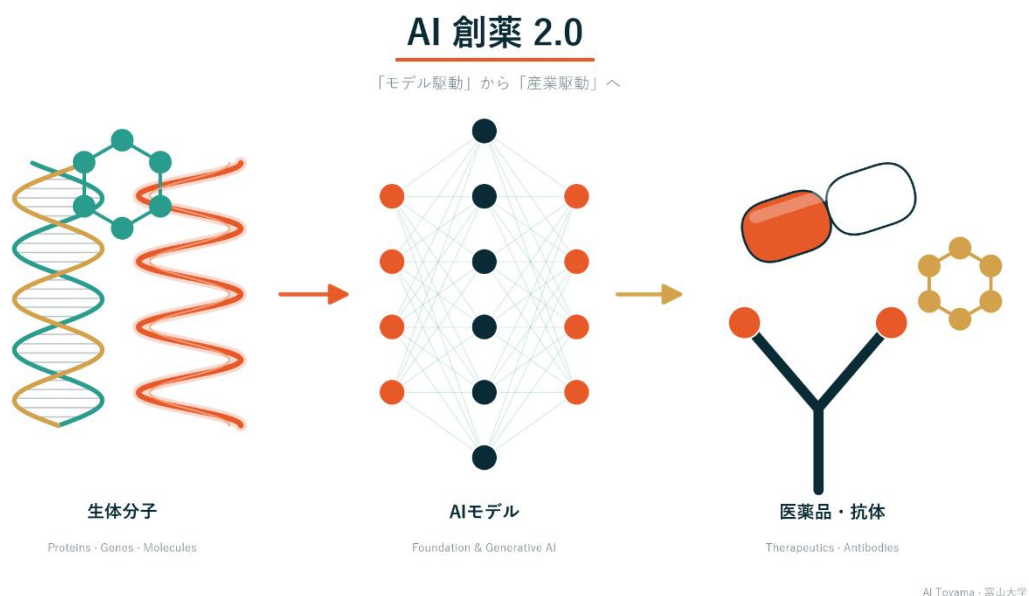
生成 AI で未来はこう変わる

富山大学学術研究部工学系 人工知能研究室 教授 高 尚策

近年、生成 AI の急速な発展により、創薬研究は大きな転換期を迎えている。タンパク質構造予測を実現した AlphaFold をはじめ、生成モデルによる新規分子設計や抗体設計技術の進展により、AI は創薬プロセス全体に浸透しつつある。さらに、2024 年のノーベル化学賞において AI を活用したタンパク質構造予測および設計技術が評価されたことは、AI 創薬が研究段階から実用段階へ移行しつつあることを象徴している。

本講演では、AI 創薬の発展を「モデル駆動型 (AI Drug Discovery 1.0)」から「産業駆動型 (AI Drug Discovery 2.0)」への変化という視点から捉え、近年の重要な技術的・産業的マイルストーンを紹介する。特に、生成 AI による分子設計、AlphaFold 3 による分子間相互作用予測、AI 創薬企業による臨床開発の進展などを取り上げ、AI が創薬研究の在り方をどのように変えつつあるのかを概説する。

また、当研究室で進めている分子特性予測、薬物-標的相互作用予測、タンパク質機能解析および抗体設計に関する研究を簡単に紹介する。最後に、生物基盤モデル (Biological Foundation Model)、AI Scientist、自律型実験システムなどの最新動向を踏まえ、生成 AI が切り拓く創薬の未来について展望する。



図：AI 創薬における生体分子・AI モデル・医薬品開発の関係

略歴

氏名：高 尚策（こう しょうさく） 工学博士

現職：富山大学学術研究部工学系 人工知能研究室 教授

学歴・職歴

2011 年 富山大学生命融合科学教育部博士課程 修了
2011 年 中国同济大学電信学院 准教授
2014 年 富山大学大学院理工学研究部（工学） 准教授
2023 年 富山大学学術研究部工学系 教授
現在に至る

所属学会

IEEE（米国電気電子工学会）、IEICE（日本電子情報通信学会）

受賞

- 2025 年-2019 年，「世界トップ 2% 科学者ランキング（単年版）」に 7 年連続選出，米国スタンフォード大学とエルゼビア社
- 2025 年-2024 年，「世界トップ 2% 科学者ランキング（生涯影響度版）」に 2 年連続選出，米国スタンフォード大学とエルゼビア社
- 2025 年-2023 年，「日本のベストコンピュータサイエンス科学者」に 3 年連続選出，Research.com
- AI 専門誌 IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems の年間最優秀編集委員（2022 年、2023-2024 年、2024-2025 年）
- AI 専門誌 IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica の年間最優秀編集委員（2021 年）
- 国際会議 2025 9th International Conference on Electronic Information Technology and Computer Engineering (EITCE 2025) 最優秀論文賞
- 国際会議 2025 13th International Conference on Advanced Cloud and Big Data (CBD 2025) 最優秀論文賞
- 国際会議 2025 6th International Symposium on Computer Engineering and Intelligent Communications (ISCEIC 2025) 最優秀発表賞
- 国際会議 IEEE CEC 2025 の最適化コンテスト 4 部門すべてで世界第一位 (Champion 賞)
- 国際会議 IEEE CEC 2024 の最適化コンテストで世界第二位 (Runner-Up 賞)
- 国際会議 ICSI 2022 の最適化コンテストで世界第二位（銀賞）
- 国際会議 IEEE International Conference on Progress in Informatics and Computing (IEEE PIC) の最優秀ポスター賞 (2015)，最優秀論文賞 (2016)，最優秀発表賞 (2017)