



NIHS特別講演会（殿町#24）

演題

連合学習を用いたQSARモデリングの動向



講師

藤 秀義 先生

ケモインフォ株式会社 代表取締役

要旨

AIへの注目度が高まるとともに、ビッグデータの重要性が高まり、AIの分野では膨大なデータをいかに集めるかが、予測精度を向上させる上での鍵となっていた。画像解析や自然言語処理におけるAI開発では、大量のデータを収集することが可能である一方で、創薬研究においては、各社が有するデータはこれらの分野と比べて圧倒的に少ない。そこで、企業間で過去の創薬データを共有出来ないかという機運が高まっていた。これまでに製薬企業間で創薬データを共有する取り組みがなされてはいるが、開示可能なデータは限定的であった。この課題を解決するために提案されたのが、Federated Learning（連合学習）である。連合学習は、各社のデータの秘匿性を担保したまま、複数企業にまたがるデータを用いて機械学習モデルを作成することが可能である。既に、MELLODDY、Effiris、DAIIAといった製薬企業が参加するコンソーシアムでは、連合学習をQSARモデリングに適用し、一定の成果を上げている。本講演では、QSARにおける連合学習の最新動向を紹介する。

ご略歴

2004年千葉大学薬学部卒（薬剤師免許）、2009年千葉大学大学院医学薬学府卒（薬学博士）。大学院では、理化学研究所にてスパコンを用いたIT創薬研究に従事。2006年度、薬学出身者初の未踏スーパークリエイターに認定。

2009年よりアステラス製薬に入社。創薬研究におけるITやAI技術の活用を推進し、臨床開発候補化合物の創出に貢献。外部連携による創薬のオープンイノベーションにも力を入れ、欧州でのMELLODDYコンソーシアムの立ち上げに唯一の日本人として参画。

2021年末にアステラス製薬退職後、2022年にケモインフォ株式会社を設立し、代表取締役を務める。Pistoia AllianceのJapan Outreach Leadを兼務し、企業間の非競争的コラボレーションを日本で進める活動に従事。

日時

2022年10月6日（木）

15:00～16:00 開場14:30

国立医薬品食品衛生研究所 2階 共用会議室

【お問い合わせ先】 国立医薬品食品衛生研究所 総務部 業務課 企画調査係
電話：044-270-6620 メール：gyoumuka1@nihs.go.jp