

生成AIとシミュレーションの連携による分子設計

横浜市立大学 生命医科学研究科 氏名 寺山 慧

目的 望みの特性をもつ分子を設計するシステムの開発を目的としている。

内容 生成AIを用いた分子設計と、量子化学シミュレーションや分子動力学計算等に基づく分子特性推定の組み合わせによる分子設計手法の高度化に取り組んだ。また機械学習による特性推定の高度化も実施した。

結果 創薬への応用例として、拡散モデルを用いた活性推定と分子生成AIを組み合わせた設計手法の開発を実施した。また新しい分子設計手法ChemTSv3を開発した。

利用した計算機
群

SQUID 汎用CPU/GPUノード

ノード時間

約1万NH

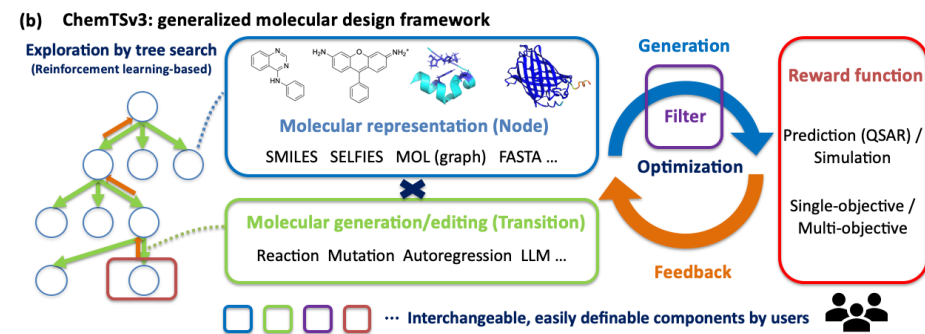


図 ChemTSv3の模式図