

**令和8年度**  
**「次世代計算科学グランドリーチプログラム」**  
**(区分A)**  
**ヒアリング審査 プレゼンテーション資料**

**令和8年4月7日(火)**

**代表機関名：京都大学大学院医学研究科・奥野恭史**

**課題名：シミュレーション・AI融合による**

**次世代スパコン医療・創薬HPC基盤の構築**

# 1. 研究開発内容

## 4本柱（基盤設計の中核）

### ① AI学習データ生成



分子動力学・マルチスケール計算で高品質データを生成し、外挿性・説明可能性を強化

### ② 次世代シミュレーション・AI



サロゲート／粗視化を含む統合探索で、高精度と高速性を両立（ポスト「富岳」対応）

### ③ 創薬・医療応用



大規模シミュレーション×AI解析で、診断・予測・創薬・臨床応用まで実装を前提に推進

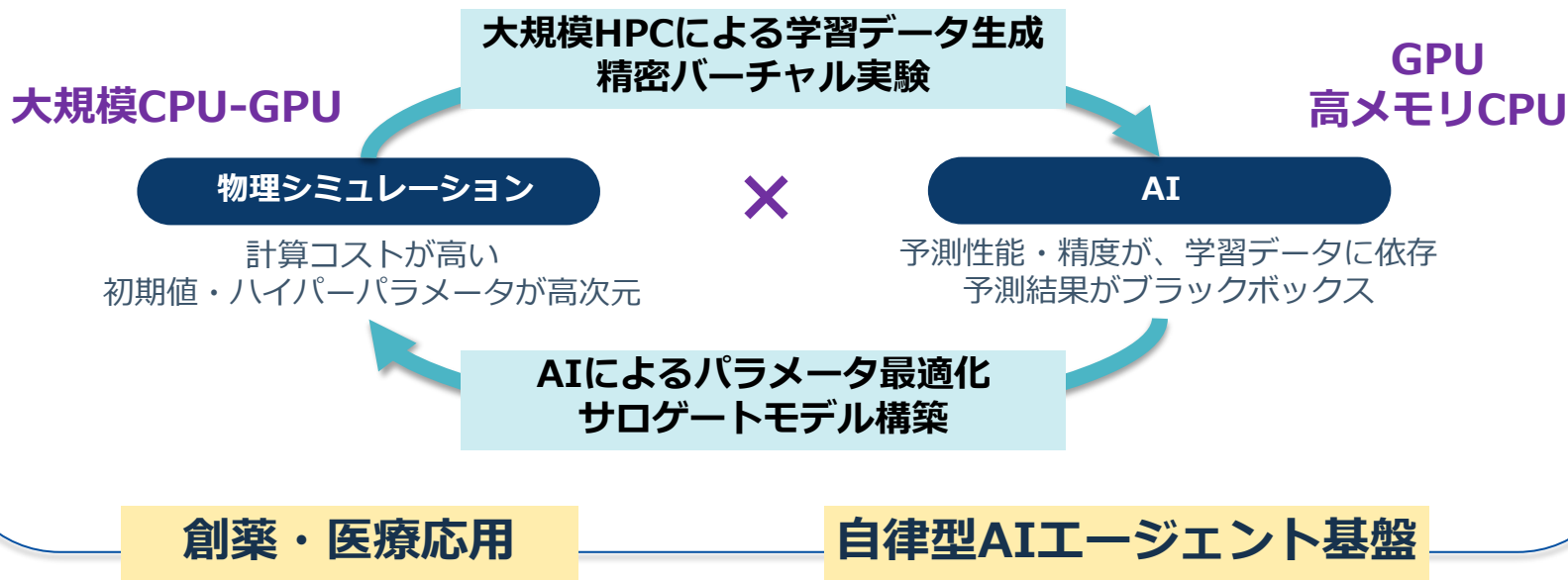
### ④ 自律型AIエージェント基盤



DB×計算×モデルを連携し、ノーコードでWFを自動設計・実行（Agentic DXPF）

## ポスト富岳を中核とするAI-シミュレーション/CPU-GPU循環統合

AI単独／物理単独の限界を相補的に解消することで、探索効率と精度の最大化



実装戦略：前半「富岳」+GPUクラスタで開発・実証 → 移植可能設計でポスト「富岳」へ移行  
分子シミュレーション／グラフ解析／生成AI／推論を適切な演算資源に配置し、AIエージェントで前処理～再計算を連携

# 1. 研究開発内容

5つの研究テーマ

## 5つの研究テーマと担当メンバー

① 病態解明のためのオミクス・分子ネットワーク解析技術の開発  
小島・櫻木（京大）

② 創薬パイプライン統合のためのAI/シミュレーション技術の開発  
低・中分子：荒木（京大）・寺山（横浜市大）・吉野（筑波大）・  
浴本（大阪公立大）、核酸・抗体：千葉（理研）・信夫（大阪大）  
・Tran（東京科学大）・山下（星薬科大）

③ インシリコ心疾患データベースおよび診断・治療AIの開発  
笹野（東京科学大）、杉浦（UTH研）

④ ポスト「富岳」を見据えたマルチスケール心臓シミュレータの高度化  
鷺尾（UTH研）、寺田（東大）

⑤ Agentic創薬・医療DX基盤の構築  
DB：鎌田（北里大）・片山（DBCLS）、AI-Agent：大塚（京大）

中核成果物

創薬DXPF  
創薬AI/シミュの統合  
ワークフロー基盤



UT-Heart  
心臓シミュ × 診断・  
治療AIの基盤



Agentic DXPF  
AIEージェントで  
ノーコード実行