

産学連携による創薬AIプラットフォーム開発 (DAIIA-X)

Development of Drug discovery AI platform through Industry-Academia Collaboration -DX

創薬ターゲット予測・シーズ探索AIの開発

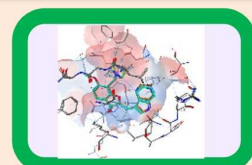
最新のAI技術とシミュレーション等の技術を融合

最先端AI技術
(生成AI等)



AIによる計算
加速と結果解析

最先端
シミュレーション技術



高精度予測
学習データの補完

AI専用機
・次世代
スパコン

・大規模学習・
シミュレーション
データ生成
・精密計算による
高精度化

マルチモーダル事前学習

公共DB

オミクス、パスウェイ、患者ゲノム、
DNA/RNA配列、タンパク配列

AI駆動型データ収集と
ファインチューニング

実験系アカデミア研究機関
・医療機関

製薬企業
・製薬協、ベンチャー、既存コンソ

連携によるDX体制構築

新規創薬ター
ゲット候補の効
率的推定と絞
り込み実現

創薬ブースター及
び企業等にお
けるWet検証
支援を実施

産学間の早期
創薬シーズ橋
渡しシステムの
構築

超効率的創薬を実現

低分子に加え、
高分子+中分子へ
適応モダリティを拡張

創薬ターゲット探索

- ・ ターゲット候補推定
- ・ 疾患メカニズム推定等

ターゲット検証
創薬シーズ探索

- ・ Wetによる検証
- ・ AIPFを駆使した創薬シーズ探索

ヒット to リード
リード最適化 (AMED DAIIA)

- ・ 先行事業との連携 → 加速・効率化
- ・ 企業共同又は導出 (企業での最適化)

創薬プロセスにおける複数のAIシステムを統合した創薬AIプラットフォームの構築を目指す。