

創薬DXプラットフォーム

FLOW
01

創薬標的
分子探索

INPUT
入力データ

患者情報
臨床データ
オミクスデータ
Bio DB / 文献

01
層別化・サンプル選択

患者層別化 / 病態マーカー推定 / バイオバンクからのサンプル選択

02
分子ネットワーク解析

オミクスプロファイル / 分子ネットワーク / 文献・知識グラフからの標的探索

03
標的同定・モダリティ推定

因果シミュレーション / AI駆動型スクリーニング / 最適モダリティ推定

OUTPUT
標的・モダリティ候補

・標的分子名
・病態マーカー
・モダリティ候補
・各予測理由

FLOW
02

薬剤
デザイン

低分子 / 中分子
核酸 / 高分子 (抗体)

INPUT
入力データ

標的分子名
Chemical Library
Assay Exp. data
Protein 1D / 3D

01
情報準備・立体構造予測

文献・既知DBからの標的分子情報 (配列・構造・機能等) の準備 / 立体構造予測

02
分子生成・相互作用予測

AI / シミュレーションによる分子間相互作用予測・活性分子探索 / 基盤モデル・生成AIによる分子生成

03
特性予測・絞り込み

活性・ADME・Developability・免疫原性・副作用予測 / シミュレーションによる高精度絞り込み

OUTPUT
薬剤候補

低・中・高分子 薬剤候補構造
特性プロファイル
予測理由