

『医薬品研究の自動化』をご支援します

自動設計と自動合成の融合による医薬候補品の自動探索

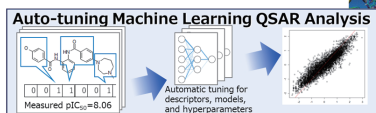
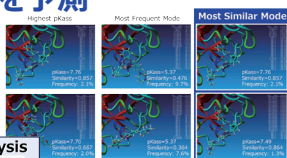


- ▶ 医薬候補化合物の探索における設計と合成の365日24時間自動実行を目標
- ▶ 実世界にて仮説立案・検証サイクルを構成し、医薬候補化合物を自律探索
- ▶ 試験稼働にて、臨床試験化合物に匹敵する化合物を自動で創出

進化する機械学習による自動設計 × 深化する機械化技術による自動合成 = 高機能化合物の自動探索

機械学習により分子特性を予測

構築したモデルから自動推算



特性推算

多検体対応フローリアクター

温度や濃度の勾配による反応暴走を回避し、事故や健康被害を防止



新規合成

暗黙知を学習し分子設計

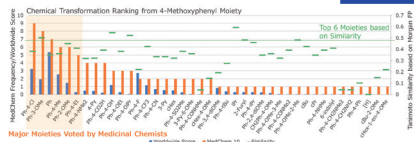
六万超の論文から創薬研究のエッセンスを自動抽出

新規設計

研究の自動化

活性実測

高次評価
実測



構造活性
相関解析

化合物特性はリアルワールドにて実測

分子構造と特性の相関性を解析
深層学習を含む多数の機械学習から、最適手法を自動構築

HTS/VS
結果

医薬候補化合物 自動探索装置

連携可能な技術・知財等

- ・創薬化学
- ・自動化合物設計および合成
- ・機械学習（深層学習など）
- ・閉塞低減型多検体対応フローリアクター
- ・特願 2017-162303 「化合物設計装置と化合物設計方法及び化合物設計プログラム」

研究概要

少子高齢化が進む我が国では労働生産性の向上が危急の課題です。そこで我々は、産業界の持続的成長を支える研究の、特に、旧来より数年の歳月を伴う医薬品創出の自動化を掲げ、進化の著しい機械学習による医薬候補品の自動設計、及び、深化の目覚ましい機械化技術による自動合成が融合した自動探索装置の完成を目指しています。

自動設計装置は、論文数万報に基づき新規化合物を設計し、深層学習を含む機械学習にて活性推算します。自動合成装置は、閉塞低減型多検体対応フローリアクターを軸に、精製装置等と連携して化合物を合成します。本装置は試験稼働にて臨床試験化合物に匹敵する化合物を創出し、創薬研究の効率化が期待されます。

(本研究は株式会社中村超硬との共同研究成果です。)