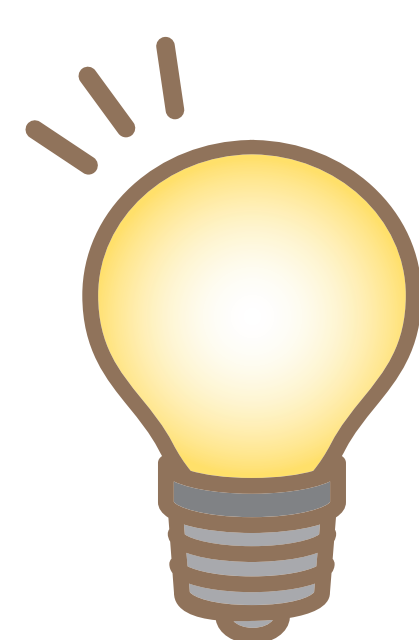


高機能化合物探索の自動化をご支援します

Robotic process automation for identification of functionalized molecules

自動設計と自動合成の融合による高機能化合物自動探索 The era of automated research has begun



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

Goal: Unmanned system for computational design and robotic synthesis 24 hours a day, 365 days a year

実世界にて仮説立案・検証サイクルを構成し、高機能化合物を自律探索

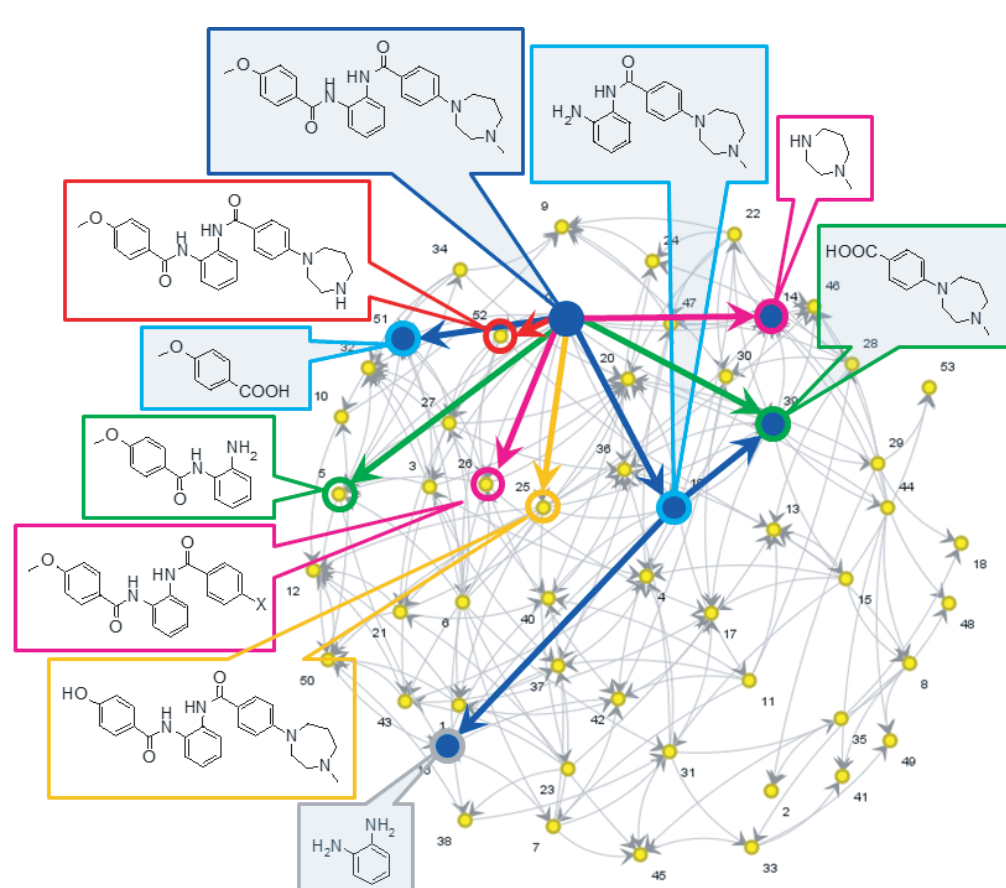
Autonomous research of functionalized molecules with cycles of hypothesis testing approach in the real world

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

Automatic identification of potent compounds comparable to a critical candidate in the test run

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

設計化合物の合成経路を自動解析



合成経路解析

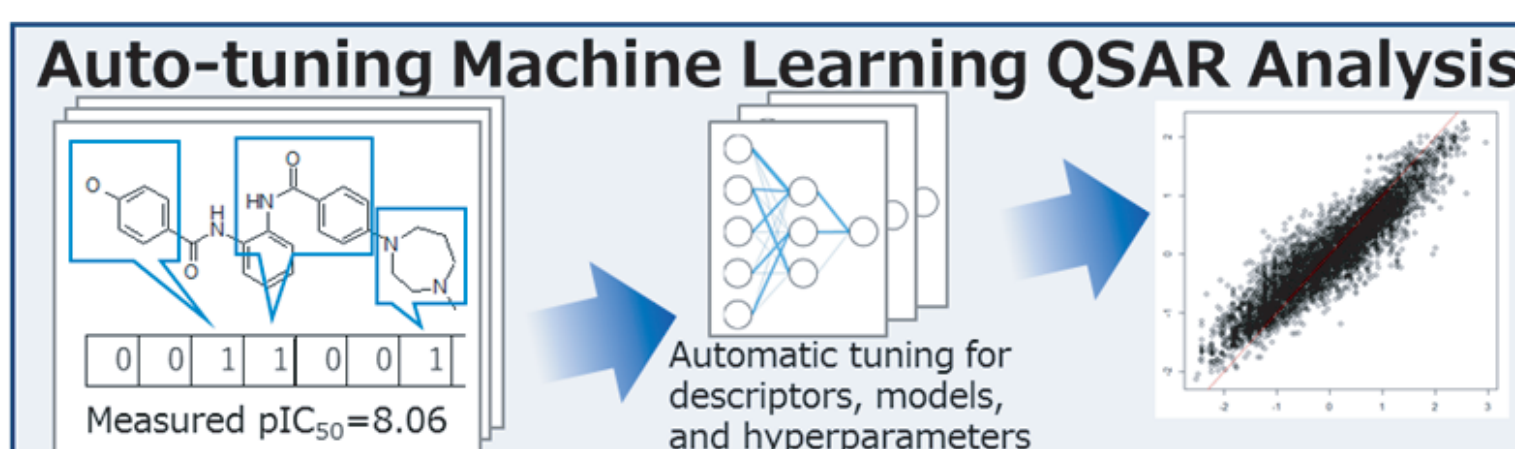
写真提供：株式会社 中村超硬



新規合成

多検体対応フローリアクターが精製装置等と連携し、自動合成

新規設計



活性実測

高次評価実測

生理活性を実測し、シミュレーションのみに起因する不確定性を低減

ライブラリ評価

構造活性相関解析

創薬化学論文6.5万報を学習し、新規化合物を自動設計

創薬化学のデータ特性に適した機械学習で自動解析し、新規化合物の特性を自動推定

医薬候補化合物 自動探索装置 (目標像)

Automated Research System for Drug Discovery (Goal Image)

※本研究の一部は、株式会社中村超硬との共同研究成果です

石原 司
Tsukasa Ishihara

バイオメディカル研究部門
Biomedical Research Institute

(研究拠点 つくば / AIST-Tsukuba)