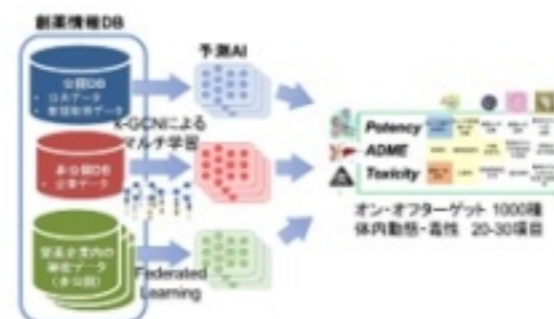


# 化合物プロファイル予測AI

京都大学  
奥野 恭史  
(研究分担者)



創薬に必要な項目の  
網羅的な予測AI



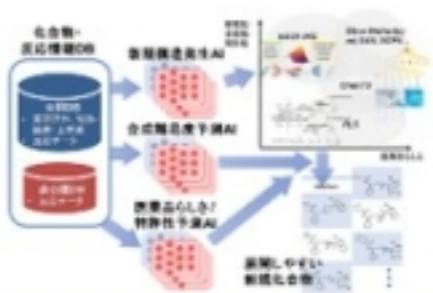
# 新規化合物提案AI

理化学研究所

本間 光貴  
(研究代表者)



具体的な有望  
化合物の提案



# 統合創薬AIプラットフォーム

ユーザーインターフェイス

現状の構造式

構造発生方法

新規性: 特許回避性 (高) / 特許回避性 (低)

新規性: 特許回避性 (高) / 特許回避性 (低)

新規性: 特許回避性 (高) / 特許回避性 (低)

※初期のhit to leadの例

現状のプロファイル

Potency	E	P	P	P	P
ADME	E	E	P	P	P
Toxicity	E	E	P	P	P

E: Experiment  
P: AI prediction

目標プロファイル優先度

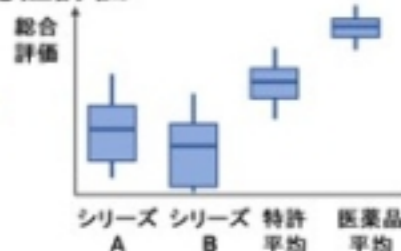
Potency	5	1	1	1	1
ADME	3	3	3	1	1
Toxicity	2	2	2	2	2

※初期のhit to leadの例

有望な構造式の出力

Structure	AI profile	AI Probability	Synth Score
		B	A
		A	B
		A	B
		B	C
		C	C

シリーズの  
展開可能性評価



# オミクス情報等の多階層 データを用いた創薬AI

名古屋大学  
山西 芳裕  
(研究分担者)



オミクス情報等による  
多面的な予測AI

