



仮説生成に特化した AI 創薬支援サービス

Drug Discovery AI Factory

lifescience.fronteo.com

Top Message

AIを活用した仮説生成で創薬研究開発にイノベーションを起こす

創薬を取り巻く環境は変化し続けています。

革新的な医薬品の開発を達成するには、そのバックグラウンドにおいて、新規性の高い標的分子の選定と検証可能な仮説の生成を継続的に行うことが不可欠です。しかし、近年は医薬品のリードとなる標的分子が枯渇し、また従来の手法による研究開発では既知の情報にしかたどり着けず、新たな発見に至るのが難しいことがジレンマとなっています。

こうした背景から、製薬企業では、かつてのように自社単独で医薬品の研究開発から上市までを担うのではなく、アカデミアやベンチャー企業などとの連携が必須とされ、異業種も含めた有機的なイノベーションが重要視されてきています。

一方で、共創やAIの活用などの技術革新が進む現在も、新規性があり背景となるロジックが明確な標的分子を見つけ出すための効率化の手法は確立されておらず、研究開発は個々の研究者の知見や着想、努力に依存しているのが実情です。

FRONTEOは、こうした創薬研究開発の課題を解決する「Drug Discovery AI Factory」事業を開始しました。

創薬とAIへの豊富な知見を持つ研究者チームが、自社開発のAIエンジンと仮説生成に特化したアプリケーション、独自の解析手法を駆使して、新規性の高い標的分子やバイオマーカーの探索・評価、メカニズム解明、適応症提案、シーズ評価をはじめとするエビデンスに基づく仮説を生成し、スピーディかつ継続的に提供します。

医薬品研究開発における仮説は、標的分子と疾患との関連性に基づくメカニズムを予測し、開発の最上流である標的探索から臨床試験、上市までのさまざまなフェーズの中で極めて重要な役割を担います。本事業を通して、創薬研究開発にイノベーションを起こし、医療の質向上と人々の健康に貢献いたします。



株式会社FRONTEO
執行役員 CTO
博士 (理学)
Drug Discovery AI Factory Executive Officer
豊柴 博義

仮説生成に特化したAI創薬支援サービス

Drug Discovery AI Factory

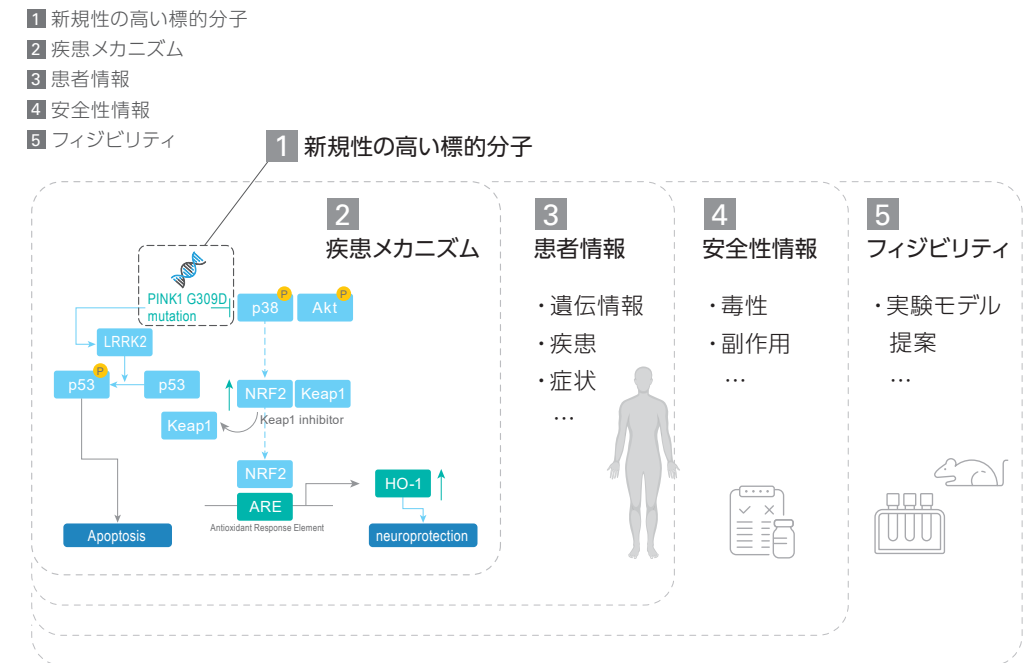
FRONTEOは、創薬プロセスにつながる「仮説」を提供

AIと創薬研究者の融合で

- 疾患関連性が未報告の、新規性の高い標的分子を選択
- 網羅的かつアンバイアスに関連性の高いつながりで構成される疾患メカニズムを作成

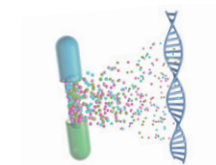
仮説生成を提供し、創薬研究の大幅な効率化・加速化・成功確率向上を支援

FRONTEOの考える仮説



AI創薬支援サービス内容

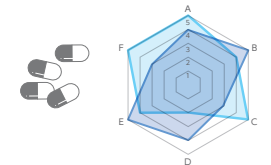
標的探索／選定
Suppressor mutation gene探索



適応症探索
(ドラッグ・リポジショニング)



導入／導出品の評価

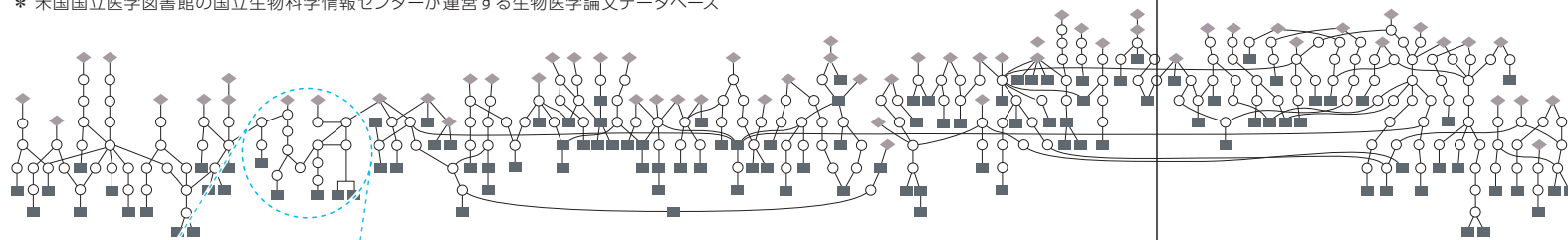


標的分子探索

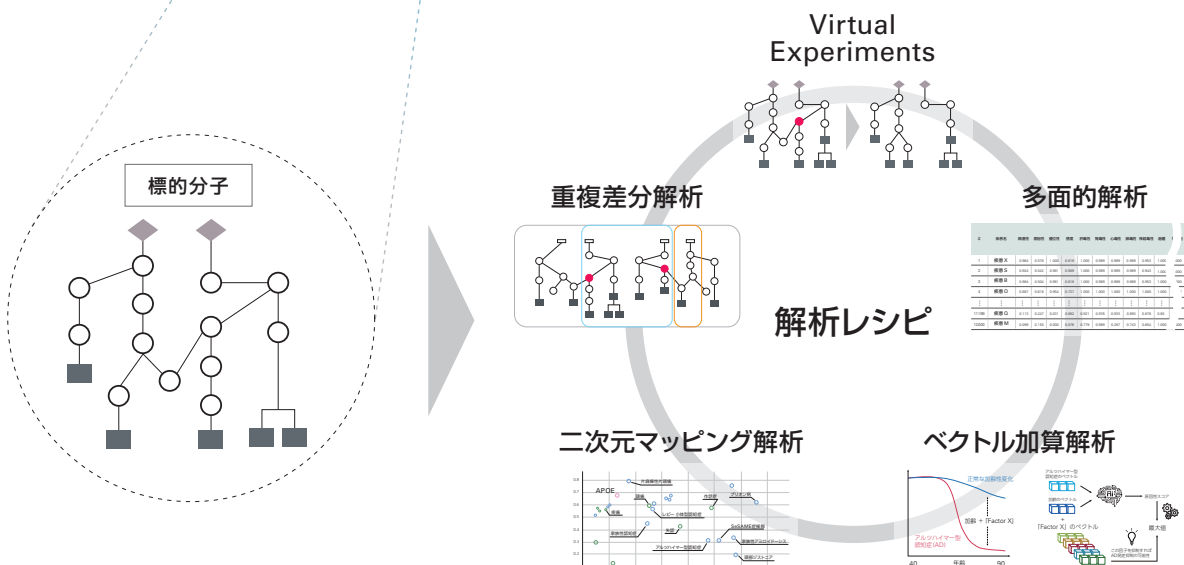
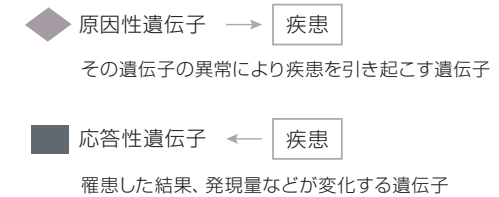
新規性があり明確なロジックに基づく最適な標的分子とその仮説を短期間で提示

開発初期の段階で有望と見られた候補化合物のうち、実際に上市されるのはわずか3万分の1と成功確率の低い医薬品の研究開発において、生産性向上のカギの一つは短期間で多くの新規性の高い標的分子を発見し、仮説を生成することです。さらに、世界で進む創薬研究プロジェクトの標的分子を可視化し、複数の異なるメカニズム(パスウェイ)から初期テーマを構成して差別化を図ることが重要です。

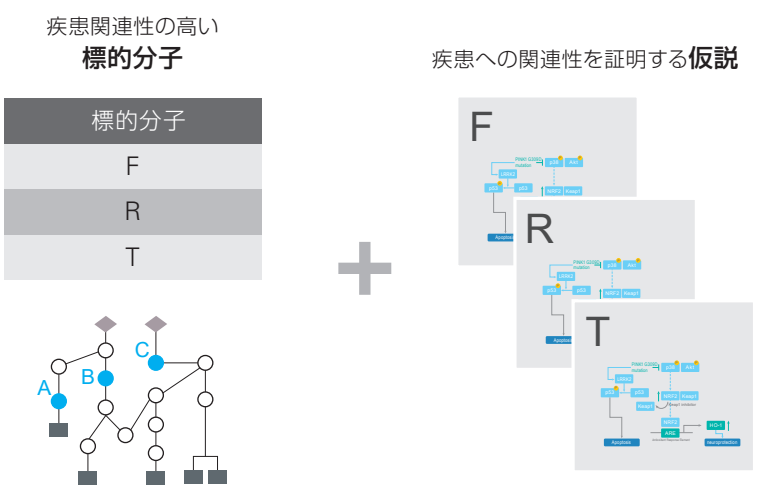
PubMed*を読み込んだ自然言語処理AIエンジン「KIBIT」が論文では未報告の遺伝子のつながりも予測して描いたパスウェイマップの例
* 米国国立医学図書館の国立生物科学情報センターが運営する生物医学論文データベース



遺伝子ネットワークの起点となる「Causality Gene (原因性遺伝子)」、終点となる「Responsive Gene (応答性遺伝子)」が一目でわかります。



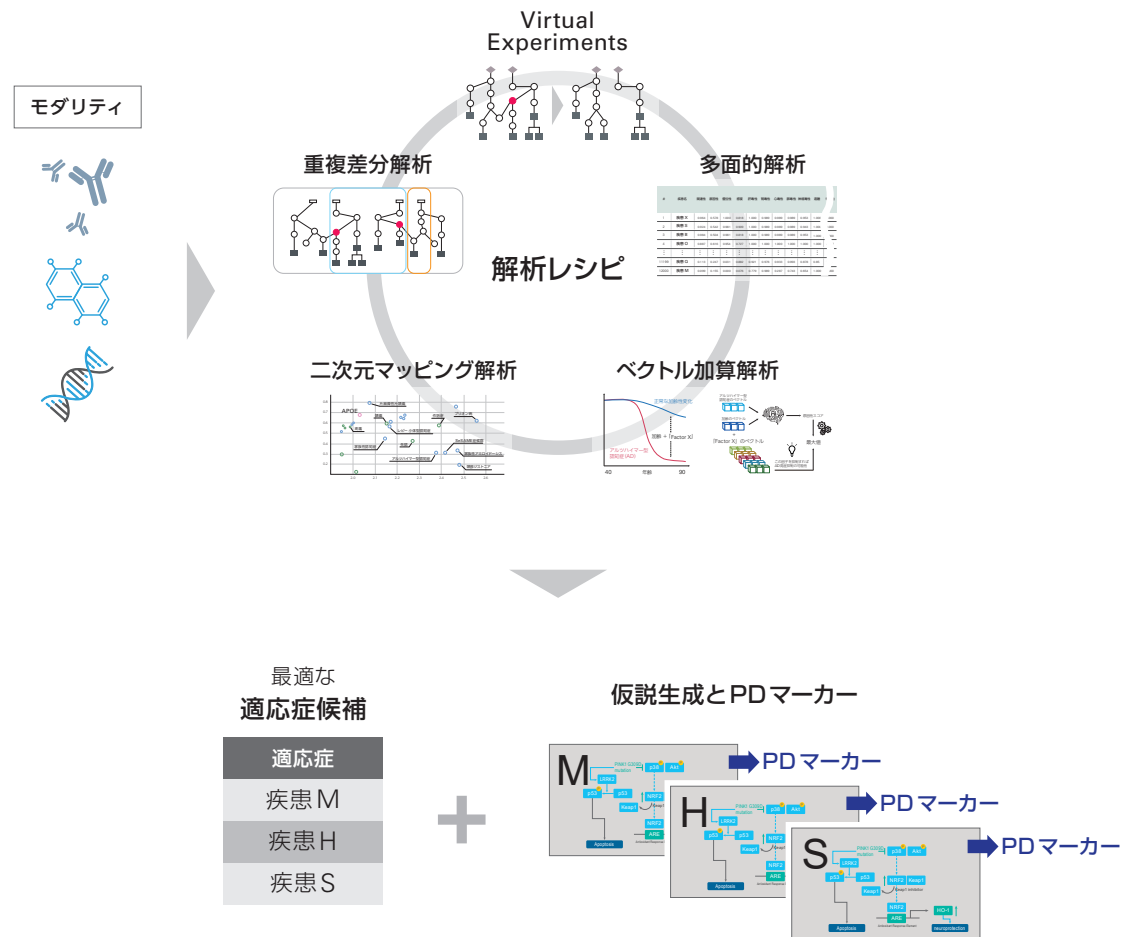
顧客のニーズに応じた、最適な解析手法の組み合わせを使用



適応症探索

候補化合物を評価し 最適な適応疾患候補とPDマーカーを提案

重複差分析や多面的解析などを組み合わせた解析レシピを活用して、候補化合物に関連する標的遺伝子間のつながり(関連性・原因性・感度・優位性)や標的遺伝子の持ち得る重篤毒性などを包括的に評価し、最適な適応疾患候補とPD(薬力学)マーカーを短期間に提案します。



高度な専門性を持つ研究者チーム

バイオロジストが生み出す 独自の解析手法とDDBKM

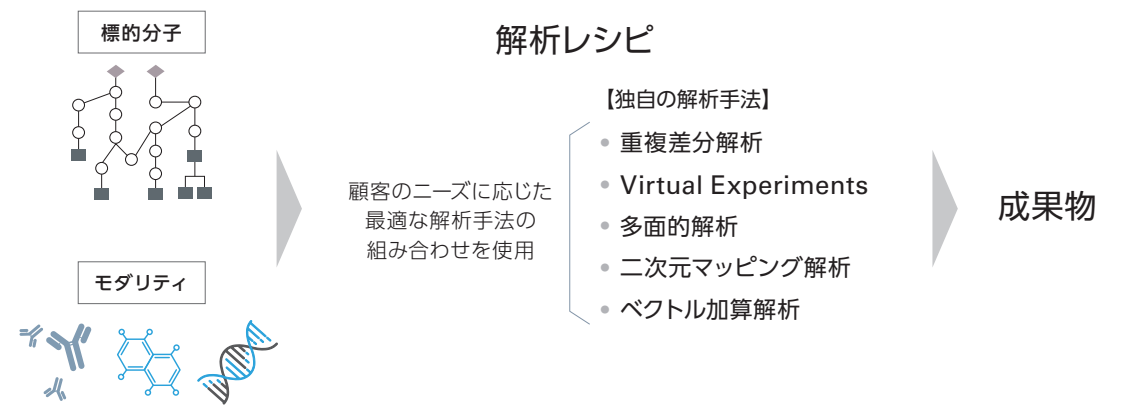
ライフサイエンス分野の豊富な知見を持つバイオロジストで構成される研究者チームが、自社開発のAIエンジン・アプリケーションを駆使し、革新的でオリジナリティの高い解析手法「Drug Discovery Best Known Method (DD-BKM)」を創出しています。

顧客との対話を通じたニーズへの深い理解とそれに基づく独自の解析手法を組み合わせた解析レシピを通じて、顧客の創薬研究を加速させます。

AIと創薬に精通した バイオロジストがドライブ

専門性の高い情報を解析し、革新的なアウトプットを導き出すには、創薬・AIの双方に精通したバイオロジストの参画が不可欠です。FRONTEOでは、長年、製薬企業や研究機関で創薬研究に従事してきた研究チームが協力し、顧客のニーズに沿った適切な標的分子や仮説生成などの有益な提案を実現します。

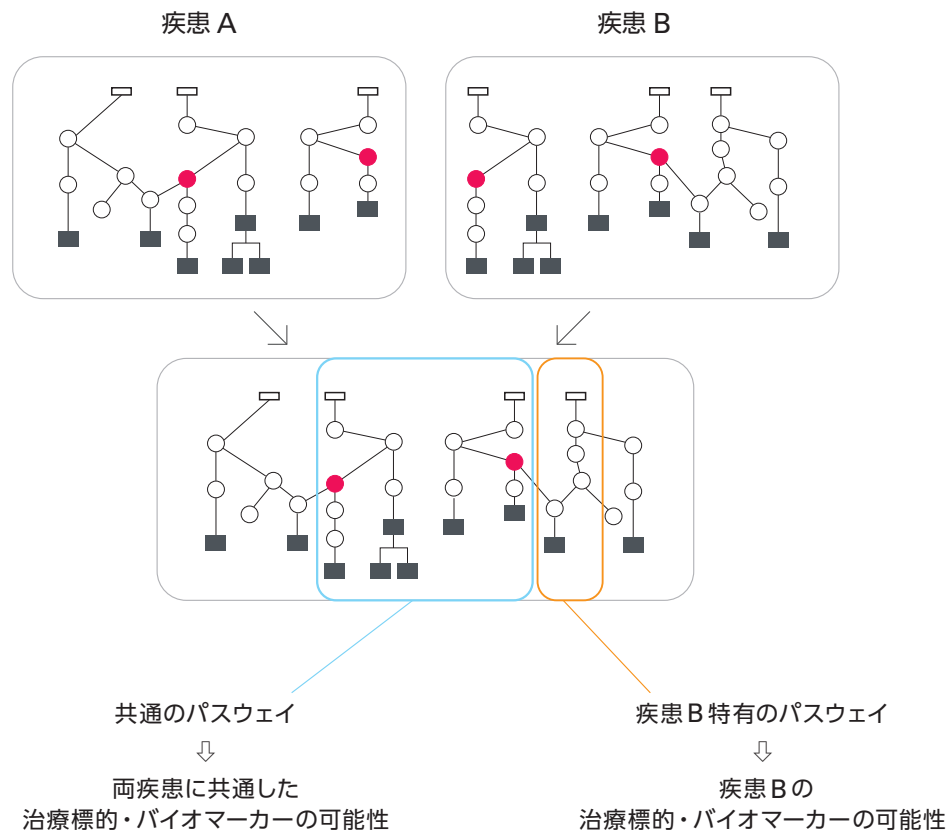
Drug Discovery Best Known Methods



重複差分解析

FRONTEOは独自の自然言語処理AIを用いて、疾患に関わる遺伝子同士のつながりをネットワークとして表現する技術を確立しています。これを活用して、まず複数の疾患ネットワークを作成し、両者を比較して、共通するパスウェイと各疾患に固有のパスウェイを見出します。

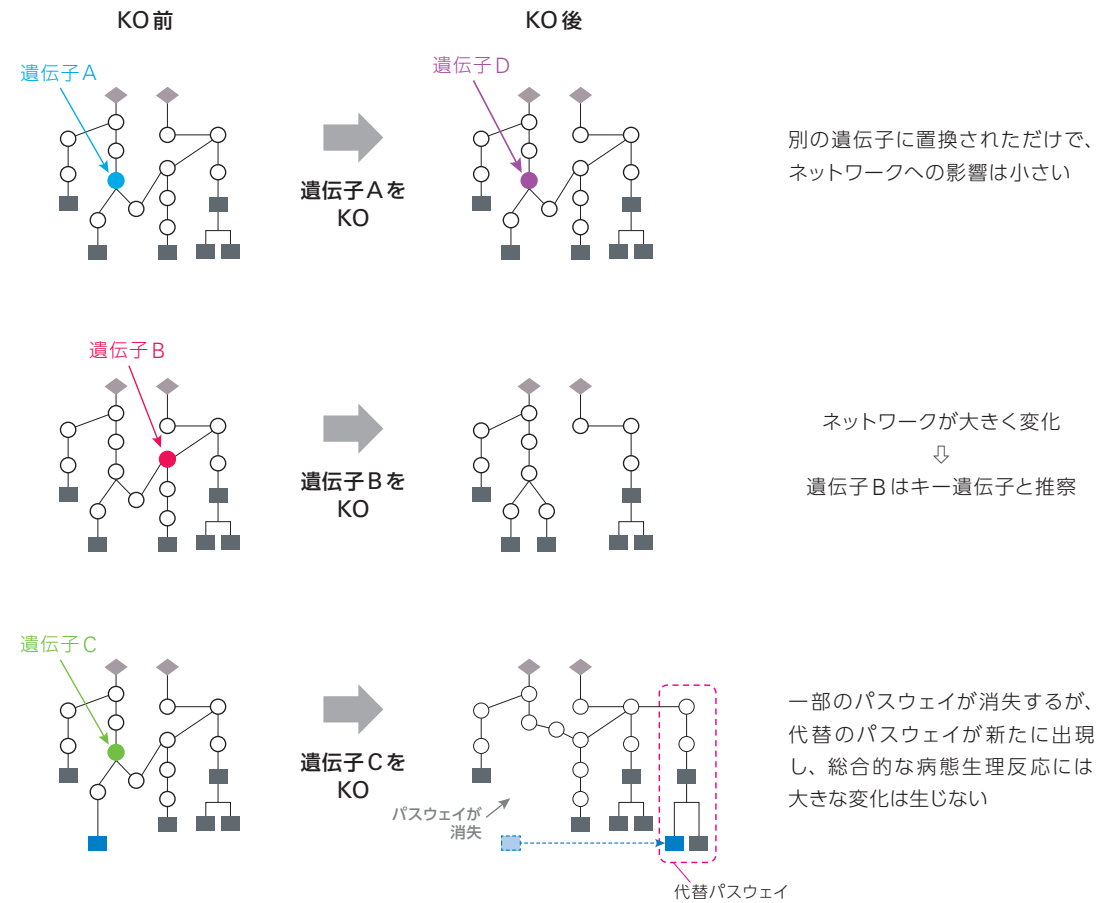
この解析結果を精査することで、新規の標的分子やバイオマーカーにつながる仮説を導き出します。



Virtual Experiments

AIアプリケーションで描いた疾患に関連する遺伝子ネットワークにおいて、注目する遺伝子を仮想的にノックアウト (KO) し、パスウェイがどのように変化するかをシミュレーションします。KO 前後のパスウェイを比較することで、注目する遺伝子の疾患における重要性や、その働きを薬剤で抑えた場合の影響を瞬時に予測できます。

FRONTEOのバイオリジストは、こうした仮想実験の結果も考慮しながら、疾患に対する新たな標的分子や作用機序の仮説を生成していきます。



多面的解析

独自の解析技術を用い、注目する遺伝子に対し、疾患との関連性や安全性、先行品の開発ステージなど、多面的な項目のスコアや情報を提示します。現在、評価対象疾患として、希少疾患を含む約1万2000疾患をカバーしています。このような網羅的・客観的な解析は、通常であればさまざまな分野の専門家の知見とかなりの期間を要しますが、FRONTEOはAIアプリケーションを活用して非常に短期間でソリューションを提供します。

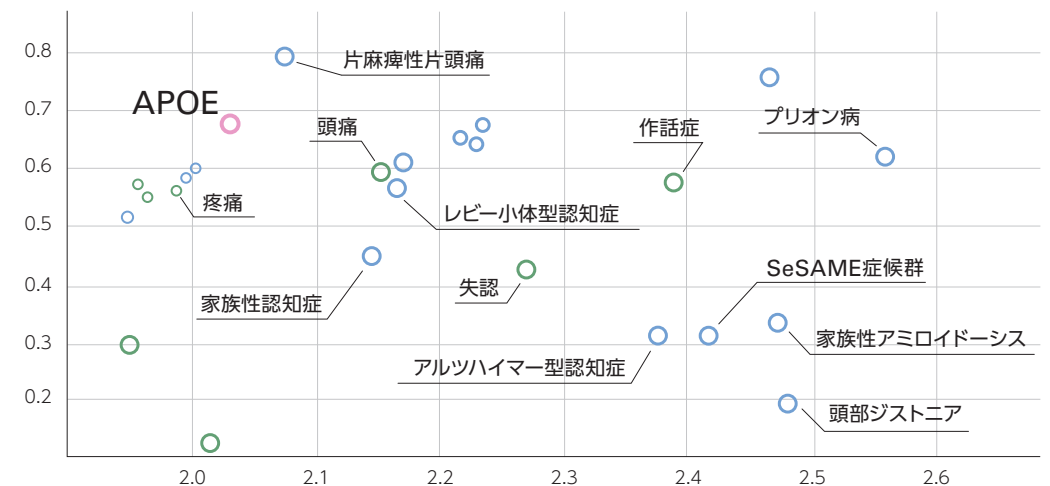
ドラッグ・リポジショニング(既存薬の他疾患への転用)はもちろん、休眠状態の候補遺伝子リストに対するウェット実験実施の優先順位付けなどにも応用可能です。

#	疾患名	関連性	原因性	優位性	感度	肝毒性	腎毒性	心毒性	肺毒性	神経毒性	造腫瘍性	注
1	疾患 X	0.964	0.578	1.000	0.818	1.000	0.989	0.989	0.989	0.953	1.000	.000
2	疾患 S	0.924	0.542	0.981	0.909	1.000	0.989	0.989	0.989	0.943	1.000	.000
3	疾患 B	0.984	0.504	0.981	0.818	1.000	0.989	0.989	0.989	0.953	1.000	.000
4	疾患 O	0.887	0.616	0.954	0.727	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	.000
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
11199	疾患 Q	0.113	0.247	0.031	0.882	0.921	0.976	0.933	0.993	0.878	0.85	.000
12000	疾患 M	0.099	0.155	0.000	0.076	0.779	0.989	0.287	0.743	0.654	1.000	.000

二次元マッピング解析

医学論文を独自の自然言語処理 AI 技術を用いて解析し、登場する単語や文書をベクトル化して、ベクトル平面上にマッピングします。この時、概念的な類似性の高いベクトル同士は近い位置に分布されます。

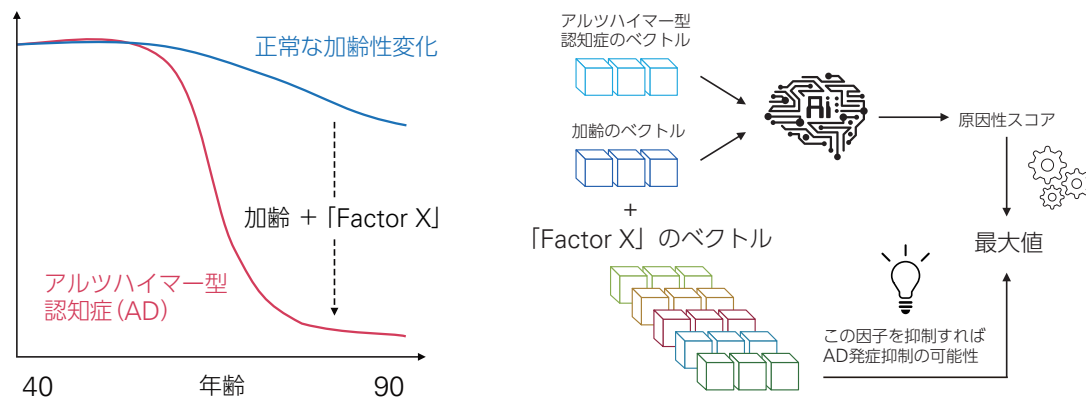
遺伝子・分子・疾患・症状などに注目し、マップ上で各因子の互いの位置関係を視覚的に捉えることで、通常では気づきにくい関連性(例: APOE と疼痛は近い位置にある=関連性が高い可能性)の発見に導きます。



ベクトル加算解析

自然言語処理における言葉のベクトル化、いわゆる数値化によって、言葉に対して数学的な四則演算を行うことが可能になります。

例えば、ヒトは加齢によって徐々に認知機能の低下を示します。また、アルツハイマー型認知症 (AD) は高齢者で発現頻度が高いこともよく知られています。しかし、すべての高齢者が病的な認知機能低下を示すわけではありません。したがって、「Factor X」が加齢を後押しすることでADが発症しやすくなると仮定します。このFactor Xは創薬標的になると考えられますが、通常そのような因子を見出すことは簡単ではありません。しかし、独自のAIエンジンによる自然言語処理的アプローチを取り入れ、ベクトル同士の足し算を行えば、Factor Xを見出すための仮説を容易に生成することが可能となり、新規性の高い標的分子やバイオマーカーの発見につながることを期待されます。



Drug Discovery AI Factory 事業の特徴

高い新規性

創薬とAIに精通した研究チームだからこそできる高度な解析とその根拠の明示

専門性の高い情報を解析し、革新的なアウトプットを導き出すには、創薬・AIの双方に精通したバイオリジストの参画が不可欠です。FRONTEOでは、長年、大手製薬企業や国際的研究機関で創薬・疾患研究に従事してきた創薬エキスパートが顧客のニーズを深く理解した上で、自社開発のAIと独自の解析手法を駆使して新規性の高い標的分子と仮説の提案を継続的に行うことが可能です。また、単にAIが導き出した情報を提示するのではなく、その情報を経験豊富な研究者がさまざまな観点から深く解析し、根拠と合わせて提示します。これにより、提案内容のブラックボックス化を防ぎ、その後の創薬研究へのスムーズな移行につながります。

高スループット

AIと独自の解析手法「DD-BKM」を活用して、短時間で圧倒的な数の標的分子などを提示

自然言語処理を強みとするAIエンジン「KIBIT」を搭載した、創薬支援に特化した多様なAIアプリケーションを開発。国内外で多数の特許も取得しています。AIの活用により、人の力のみによる創薬研究に比べ、網羅的・アンバイアスな解析による新規性の高い仮説生成のチャンスが増えることに加え、多数の標的候補を短時間で提示するなど、研究の大幅な効率化とそれに伴う研究費の削減に寄与できると考えます。また、ますます深化する創薬研究に貢献し続けるために新しい解析手法とその複合的な解析レシピの継続的な研究開発にも注力しています。

高カバレッジ

複数のメカニズム (パスウェイ) に基づく標的分子候補を網羅的に提案

自社開発のAIアプリケーションで数千万報の医学論文を解析し、分析対象としたい疾病に関連する分子や遺伝子のパスウェイマップ (関連性を表す経路図) を作成します。研究チームはこのパスウェイマップを活用して、例えば、異なるパスウェイに由来する標的分子も網羅的に提案することができます。

仮説生成のための発見型概念検索AIシステム

- 創薬研究者が仮説生成のために開発したAIシステム
- 分布仮説*1に基づいたアルゴリズムで、類似性・関連性の高い論文を抽出
- 仮想的に概念を足し引きし、新たな着想を得る

FRONTEO独自の自然言語処理AI技術を用いた論文探索AIシステムです。単語や文章、仮説を入力すると、AIがPubMed*2に掲載されている膨大な論文情報から、類似性・関連性の高い論文情報を即時検出・解析します。人の作業では膨大な時間を要していた作業が大幅に効率化されることに加え、従来のキーワード検索では発見できなかった情報や、検索者によるバイアスの掛からない情報を見つけることが可能となり、医学・創薬研究における客観的・網羅的な分析を実現します。企業・機関が独自に保有するデータを読み込ませるなどのカスタマイズにも対応する、拡張性の高いアプリケーションです。(特許登録番号: 特許第6976537号)

KIBIT Amanogawaの特徴

アンバイアス(Unbiasedness): 膨大な数の論文を客観的・網羅的に解析

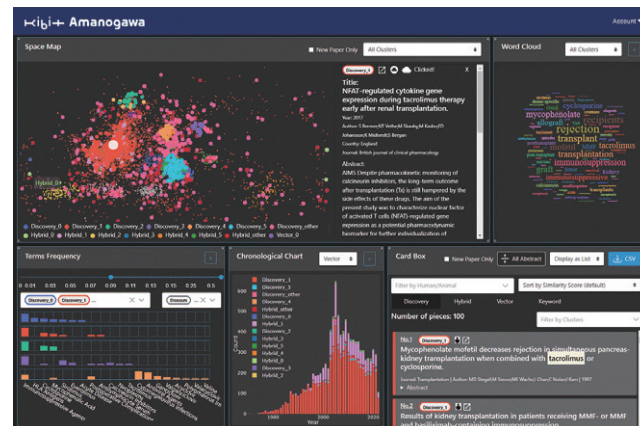
膨大な論文情報を、研究者の知識・関心や掲載ジャーナルなどの影響を受けることなく、AIが客観的・網羅的に解析。単語や文章を関連性・類似度に基づいてベクトル(数値)に変換し、位置情報として提示するため、結果を一目で把握できます。

セレンディピティ(Serendipity): 予想外の発見に出会う確率を上げる

ベクトル変換技術により、キーワード検索では見つけれなかった予想外の情報や文献も検出。「ガンは除く」など不要な要素を除外した検索も可能なため、他領域や未知の情報へのアクセスも効率的に行えます。

ディスカバリ(Discovery): 新たな着想を得る

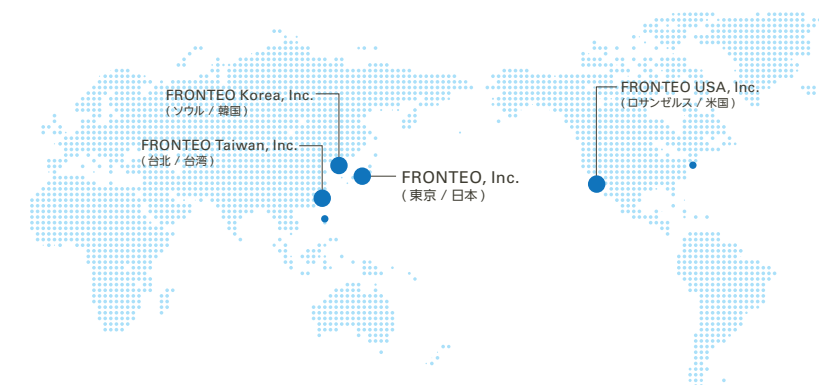
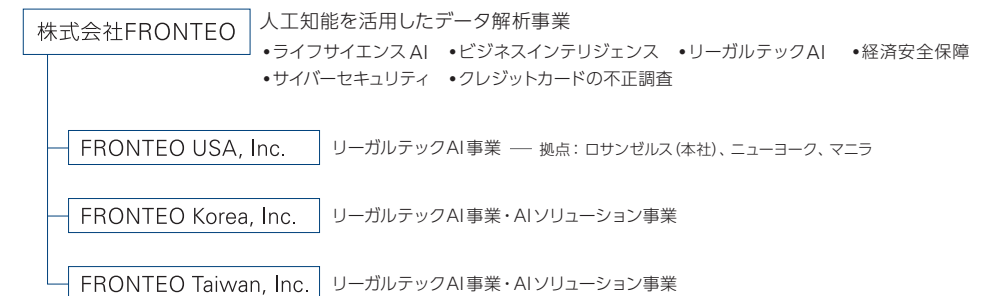
KIBIT Amanogawaでの発見や気づきから新たな着想を得て、研究の進展やさらなる探索につなげることができます。



*1 自然言語処理における、単語はその周りの単語で特徴づけられるという考え方(Harris Z., 1954, Distributional Structure, WORD, 10:2-3, 146-162.)

*2 米国国立医学図書館の国立生物科学情報センターが運営する生物医学領域の論文データベース。https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/

FRONTEOグループ概要 (2023年10月1日現在)



会社情報

(2023年3月31日現在)

商号	株式会社FRONTEO (FRONTEO, Inc.)	上場証券取引所	東京証券取引所グロース(証券コード:2158)
設立	2003年8月8日	主要取引先	官公庁(法執行機関・各種監視委員会)、国内外法律事務所、民間企業(機械・金融・自動車・商社・情報通信・精密機器・製薬・石油化学・電機など)、医療機関、研究機関
本社所在地	東京都港区港南2-12-23 明産高浜ビル	加盟団体	言語処理学会、国策研究会、人工知能学会、デジタル・フォレンジック研究会、日本カード情報セキュリティ協議会、日本公認不正検査士協会、日本セキュリティ・マネジメント学会、日本ソフトウェア科学会、日本メディカルAI学会
代表取締役社長	守本 正宏	従業員数	288人(連結)
資本金	3,042,317千円	売上高	7,215,270千円(2023年3月期連結)

KIBIT、Drug Discovery AI Factory、Amanogawaは株式会社FRONTEOの登録商標です。

株式会社FRONTEO

お問い合わせ先
ライフサイエンスAI事業本部
lifescience.fronteo.com/contact



lifescience.fronteo.com

