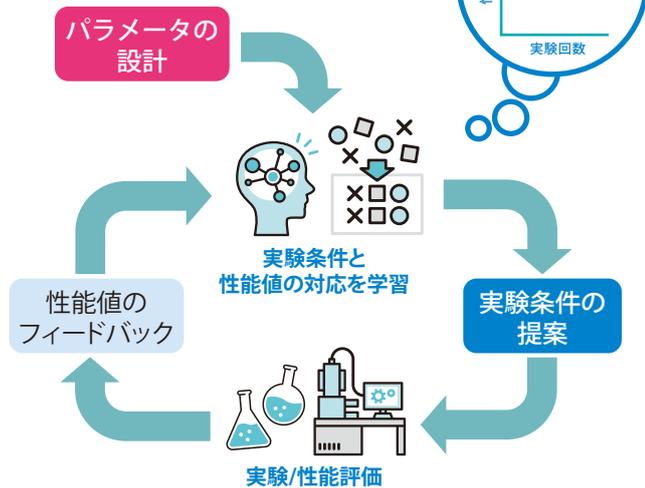


データ駆動型の研究開発支援

パラメータの設計から実験条件の提案まで、総合的に実験計画をサポートします。

データ駆動型の研究開発

総合的な実験計画のサポート

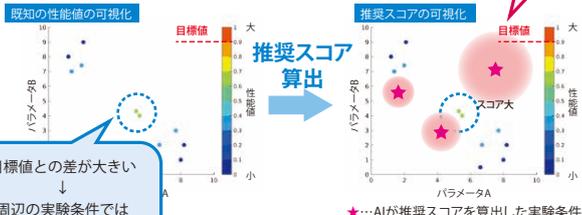


サポート① 効率の良い実験条件の提案

- 膨大なパラメータの中から最適な実験条件を選択することは困難
- 実験結果の傾向からAIが「推奨スコア」の高い実験条件を提案

既知の性能値のみで判断するよりも、効率良く実験条件を選択可能

目標値を達成するには次はどこを探索すべきか？



目標値との差が大きい
↓
周辺の実験条件では類似結果しか得られない

サポート② 目的に応じたパラメータの設計

- 適切にパラメータを選択することが実験計画の成否を分ける
- 効率的に実験条件を探索するためにパラメータの設計をサポート



目的を達成するために
総合的に実験計画をサポート

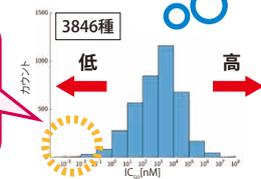
適用事例

効率的な化合物の探索方法の検討

【実験テーマ】IC₅₀の低い化合物の探索

アセチルコリンエステラーゼに対し
阻害活性を示す化合物群

データ駆動型の
実験計画法を用いて
IC₅₀の低い化合物を
効率良く探索できる方法を検討

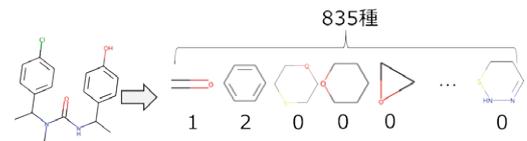


構造式のパラメータ化の検討

2通りの方法でパラメータ化を実施

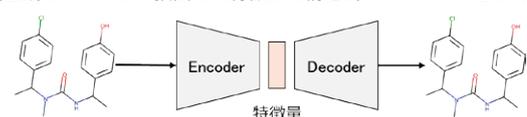
✓ 部分構造のカウントによるパラメータ化

構造式に含まれる部分構造の個数を構造式のパラメータとして使用



✓ 生成モデルによるパラメータ化

構造式生成モデルにより抽出した特徴量を構造式のパラメータとして使用



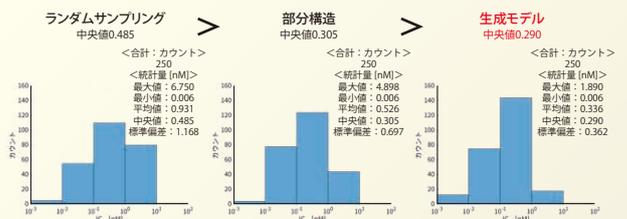
※化合物 22 万種を学習

化合物の探索結果

化合物 3846 種の中から 140 種を探索し、
上位の IC₅₀ を記録した。

生成モデルの
特徴量を用いることで
効率的な探索を実現

【上記を50回繰り返した結果】



パラメータを適切に設計することで
より効率的な探索が可能