

Elix における AI 創薬と最新動向 AI Drug Discovery at Elix

結城 伸哉
Shinya Yuki

株式会社 Elix
Elix, Inc.

株式会社 Elix は「創薬を、再考する」をミッションとした AI 創薬スタートアップである。創薬における最大の課題は創薬の非効率さであり、10 年以上の期間と 1000 億円以上のコストがかかる。創薬の効率については Eroom's law と呼ばれる (Moore's law のスペルを逆にしたもの) 傾向があり、創薬コストは指数関数的に増大している。2010 年頃からはこの傾向に変化があり、横ばいになってきたとするデータがあるものの、依然として膨大なコストがかかっている。

これを解決する有望な手段の一つとして AI 創薬が注目を集めている。AI 業界全体を見渡しても 2020 年の AI への民間投資額が最も大きかった分野は AI 創薬であり、自動運転などよりも大きくなっている。また、化学分野での AI 関連論文数も急速に伸びており、大きな注目を集めるとともにアルゴリズムも発展してきている。

Elix では最先端技術を盛り込んだ独自の AI 創薬プラットフォームを開発している。プラットフォームの重要なモジュールである Elix Predict、Elix Create、Elix Synthesize を中心に最新の自社研究成果を交えつつ紹介する。

Elix Predict は活性や物性の予測を行うモジュールであり、従来の機械学習から最新のグラフベースのモデルまで揃えている。適用事例として、アンドロゲン受容体に対して活性のある化合物の予測を行った研究を紹介する。Elix Create は構造発生を行うモジュールであり、所望の物性を持つ化合物の生成を可能とする。フラグメントベースのモデルからグラフベースのものまで独自アルゴリズムのモデルを揃えており、こちらも自社研究を交えて紹介する。Elix Synthesize は逆合成解析を行うモジュールであり、独自に実装したモデルを保有している。また、逆合成解析をより快適に行うためのライブラリのオープンソース化を予定している。

AI を扱う上で、データも非常に重要な要素である。より少ないデータでの学習を可能にする self-supervised learning の研究や、複数企業のデータのプライバシーを守った状態で学習を行う federated learning の紹介も行う。Federated learning についてはフレームワークのオープンソース化を予定している。