

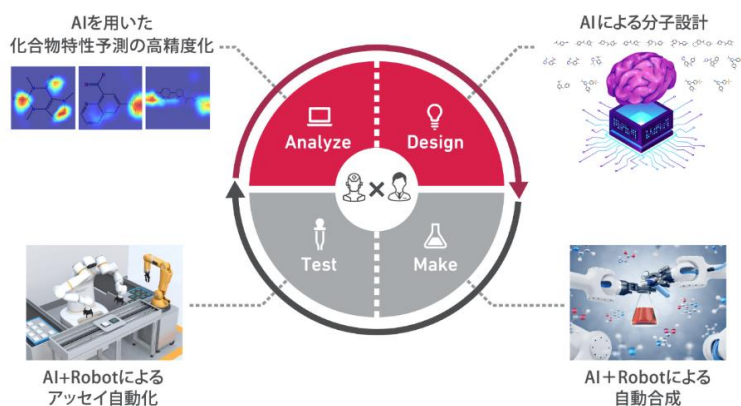
## アステラス製薬のデータ駆動型創薬とデジタルトランスフォーメーションの推進 Data-driven drug discovery and digital transformation in modality research at Astellas

田端 健司  
Kenji Tabata

アステラス製薬株式会社モダリティ研究所 所長  
Modality Research Labs. Astellas Pharma Inc.

創薬化学で培われた機能性分子設計の能力と知見を活かした、高質なモダリティの迅速かつ効率的な探索・最適化を可能にするシステム構築をデータ駆動型創薬の例として紹介し、アステラス製薬におけるデジタルトランスフォーメーション（DX）についてお話したい。

創薬化学手法の変化は早く、アステラス製薬の取り組みとしては、自前の化合物ライブラリーから脱却したオープンライブラリー（J-PUBLIC）の活用、自前合成から外注合成、ロボットによる自動合成、デジタル技術による仮想合成へと進化している。創薬研究者の役割も大きく変化し、人工知能（AI）やロボティクスといったデジタルテクノロジーと共生することが求められる。化合物の最適化プロセスは、Design-Make-Test-Analyzeのサイクルを速く高品質に回転させることに尽きる。



このサイクルでは、通常ある一つの特性だけではなく多様な特性の同時最適化が必要であり、大量データの把握において人間の頭脳を遥かに超えるAIの活用が極めて効果的である。AIがデザインした化合物をロボットが合成・評価し、そこから得られた実験データ

を基にAIが再学習し、より賢く進化する。究極的には、AIの中で自己完結し実験なしに医薬品を創出できる未来に期待したい。しかしながら、少なくとも現時点においては、AIとロボットだけで創薬を実践するには課題も多いため、研究者とAI、ロボットのコラボレーションによる共存共栄を目指している。つまり、人間の思考パターンや実験データを学習したAIを用いて得たアイデアを、人間とロボットが実験し、その結果をAIと人間がまた活用する、といったサイクルを繰り返すシステムの構築を目標にしている。これらを達成するためには、ユーザーフレンドリーなAIやロボットの開発や導入だけではなく、研究者がDXを実践する組織風土やAI/ロボティクスを自由自在に使いこなす研究者のリテラシーの向上も求められる。

アステラス製薬では、研究者とAI、ロボットが共生するデータ駆動型創薬プラットフォームを構築しており、モダリティ研究において実運用を開始し一定の成果も得られている。DX推進のための組織風土改革も合わせて紹介したい。