

生成モデルを中心としたAI創薬最前線

Cutting-edge AI drug discovery centering on generative models

結城 伸哉

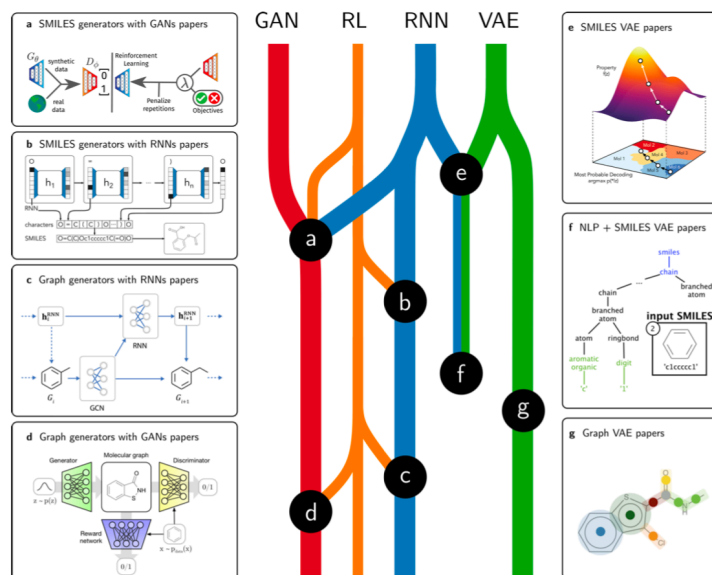
Shinya Yuki

株式会社Elix

Elix, Inc.

ディープラーニングは画像や自然言語処理などで大きな成功を収めてきたが、近年は分子設計にディープラーニングを適用する研究も多く見られるようになってきた。Generative Adversarial Network (GAN)、Variational Autoencoder (VAE)に代表される生成モデルと呼ばれるデータを生成するタイプのモデルにより、狙った特性を持つ候補化合物を生成できるようになってきている。

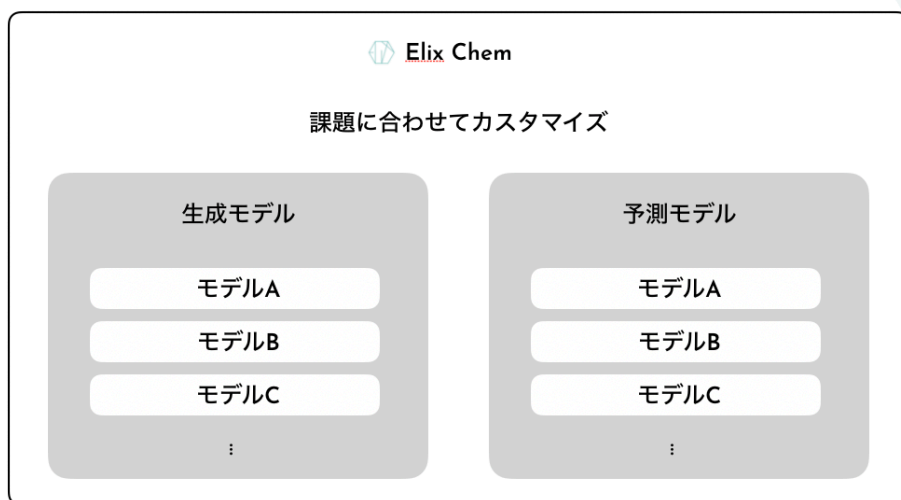
GAN、VAE 以外にも関連する要素技術として RL、RNN、Graph があり、その組み合わせは多岐に渡る。生成モデルによる分子設計は近年急速に注目を集めており、関連論文はここ 2 年だけでも少なくとも 40 本以上存在する。本講演では基礎的な部分から最先端の研究動向まで網羅的な解説を試みる。



(Source: <https://arxiv.org/abs/1907.01632>)

また、弊社では様々な生成モデル・予測モデルを保有している。各社の課題に合わせて

カスタマイズし、直ぐ利用可能な AI 創薬支援サービス Elix Chem の提供を開始している。本講演では Elix Chem の簡単な紹介も行う。



(問い合わせ先 : info@elix-inc.com / <https://www.elix-inc.com/jp>)