

株式会社 Elix は 最新の技術で AI 創薬を支援する テクノロジー企業です



ELIX

Elix は 2016 年 11 月に創業し、東京・シンガポールに拠点を持つ、ディープラーニングに特化したテクノロジー企業です。

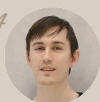
英語を公用語とし、優秀な AI エンジニア・AI リサーチャー、生物学者、化学者、物理学者を世界中から集めることで、高い研究開発力・技術力を実現しています。

最新の研究結果をいち早く産業に応用することで、みなさまのビジネスに貢献してまいります。

Channel
2

10月 28日 (水) 13:00 ~ 14:30

4 人のスピーカーが弊社サービスおよび最新の取り組みをご紹介します

- | | |
|--|--|
| <p>01  結城 伸哉 (代表取締役 CEO)
「Elix における AI 創薬事業紹介と最新研究動向」</p> <p>03  Jun Jin Choong (AI エンジニア)
“Generative Models for Molecular Design”</p> | <p>02  Nazim Medzhidov (リサーチエンジニア)
“Predicting inhibitors for SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA polymerase using machine learning”</p> <p>04  Romeo Cozac (AI エンジニア)
“Deep Learning for Retrosynthetic Route Planning”</p> |
|--|--|

ディープラーニング (AI) の最先端技術を創薬に応用

AI 創薬支援サービス

3 つの特徴

① 期間短縮 & コスト効率

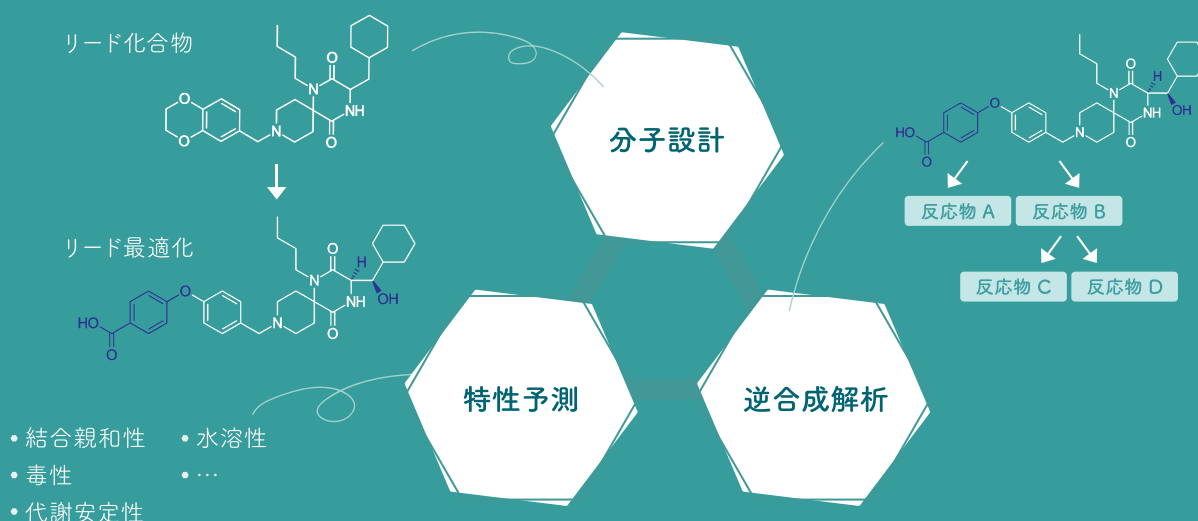
最先端のモデルで高速に特性予測・構造発生を行うことにより、開発期間を短縮できます。

② 新規性

人間が思いつかない構造を発生させることで、化学者を支援します。

③ サポート

最先端の技術を有する弊社研究者・エンジニアがしっかりとサポートします。



契約形態

ライセンス

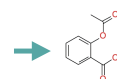
共同研究

#01

分子設計（生成モデル）

Generative models

モデル



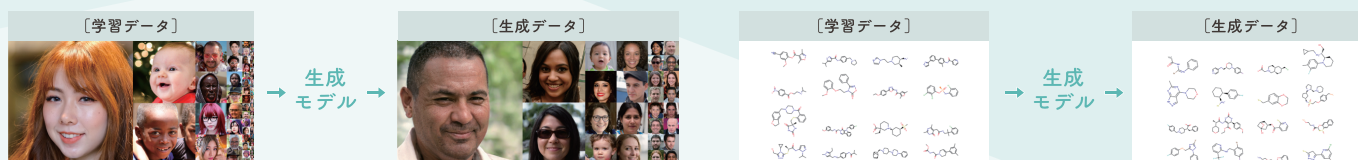
候補化合物の生成

- 生成モデルと呼ばれるモデルにより、候補化合物を生成します。
- 学習データと似ているが異なる新しい化合物をコンピュータ上で生成できます。

化合物の最適化

- 単に生成するだけでなく、所望の特性を持たせることも可能です。
- 化合物の最適化や特定の部分構造を固定したうえでの最適化も可能です。
- 人間（化学者）が思いつかない新規の分子構造を提案できる可能性もあります。

生成モデルは画像生成によく用いられますが、弊社では分子生成に応用しています。



#02

特性予測（予測モデル）

Predictive models



モデル

予測値

高速

- 実験やシミュレーションは非常に時間がかかります。
- 典型的事例ではシミュレーションの 10 万倍の高速化が可能です。
- 候補化合物を効率よくスクリーニングすることが可能です。

実験やシミュレーションとの組み合わせ

- 予測モデルでスクリーニングすることで、良い特性が出ている化合物のみを実験することができ、効率化に繋がります。
- 実験やシミュレーションから得られたデータを追加学習データとして利用し、さらに予測モデルの精度向上が可能です。

#03

逆合成解析

Retrosynthesis models



モデル



合成可能性

- 生成モデルから提案された化合物が合成可能とは限りません。
- 合成するためにはまず合成可能性を検討する必要があります。

効率的な探索

- 膨大な合成経路パターンから、最適な合成経路を予測します。
- 機械学習ベースの独自アルゴリズムにより、効率よく高速に探索します。

◆ 弊社の主要取引先・研究機関・採択プログラム

京都大学大学院
医学研究科

BRIDGESTONE

NIPPON
SHOKUBAI株式会社三菱ケミカル
ホールディングスHONDA
The Power of Dreams

KONICA MINOLTA

CAC
株式会社シーエーシーBlockbuster
TOKYONVIDIA
INCEPTION PROGRAM

株式会社 Elix

〒102-0081 東京都千代田区四番町 8-34 第2 東郷パークビル 3 階

<https://www.elix-inc.com/jp/>info@elix-inc.com