



CBI学会2019年大会、2019年10月24日(木)、FS-17

ビッグデータ時代の 未来化学データサイエンスシステム

株式会社 インシリコデータ
湯田 浩太郎

新たな未来システムの提案

1. 総合研究支援AIロボットの提案

専門AIシステムや関連機能／ツールを用いて、より強力／高度な機能を持つAIシステムの設計をサポートする上位のAIシステム

総合研究支援AIロボット⇒

専門AIシステムを複数連携し、より高度／複雑な仕事を行う**複合型AIシステム**を構築

2. 創薬工場ロボットの提案

現状：単位反応的ロボットや全合成ロボットは単体で動くことを想定。

創薬工場ロボット⇒

単位反応ロボットを多数用いて同時に稼働し、多数の化合物を大規模に合成する

1. 総合研究支援AIロボットの提案

例:

- ① 単一機能AIロボット(画像診断)⇒診断精度向上、高速化
- ② 単一機能AIロボット(治療／投薬)⇒治療の実施
- ③ 単一機能AIロボット(デザイン)⇒化合物のデザイン

「総合研究支援AIロボット」

複合AIシステム:(例)

「乳がん」の検診をして、治療計画を立て、投薬し、新規化合物のデザインまで実施するAIロボット

日々変化／向上する技術的環境

コンピューター:

ハード; IoT, IT, インターネット, クラウド, スパコン, その他
ソフト; Java, C, HTML, Python, TensorFlow, R, その他

データ解析:

解析手法; より強力で新規のデータ解析手法の展開
データ関連; データの多様化(文字／数値／画像／音声)
データ量の急激な拡大(ビッグデータ)

人工知能:

ニューラルネットワーク; CNN, DNN, 深層学習, 強化学習, 他

分析機器:

ハード(種類と機能); クライオ電顕開発、感度／精度向上、他
ソフト; 多次元リアルタイム計測、データ記録様式、

日々変化／向上する研究手法

創薬関連:

ドラグリポジショニング、マルチターゲット創薬、AI創薬、並列創薬
創薬データサイエンス、テーラーメイドモデリング、他
HTS、ロボット創薬、マイクロ(微量)ドラッグ、iPSを用いた創薬、他

化合物関連:

コンビナトリアルケミストリー、ロボット合成、有機分子触媒、
光／伝導性／分解性ポリマー、有機EL、その他

毒性／環境関連:

計算毒性学、トキシコメタボロミクス、AOP、毒性評価手法、他

バイオ関連:

次世代シーケンサーと解析、様々な遺伝子組み換え実施、他

創薬

物性

医療

コンピューター

化学多変量解析 / データサイエンス
パターン認識 AI(人工知能)

化合物

物性情報

薬理活性情報

遺伝子情報

化合物情報

毒性情報

文字情報

医療情報

画像情報

数値情報

スペクトル情報

音声情報

□データやシステムの階層構造

化合物

創薬 物性 医療

種々データ/ビッグデータ

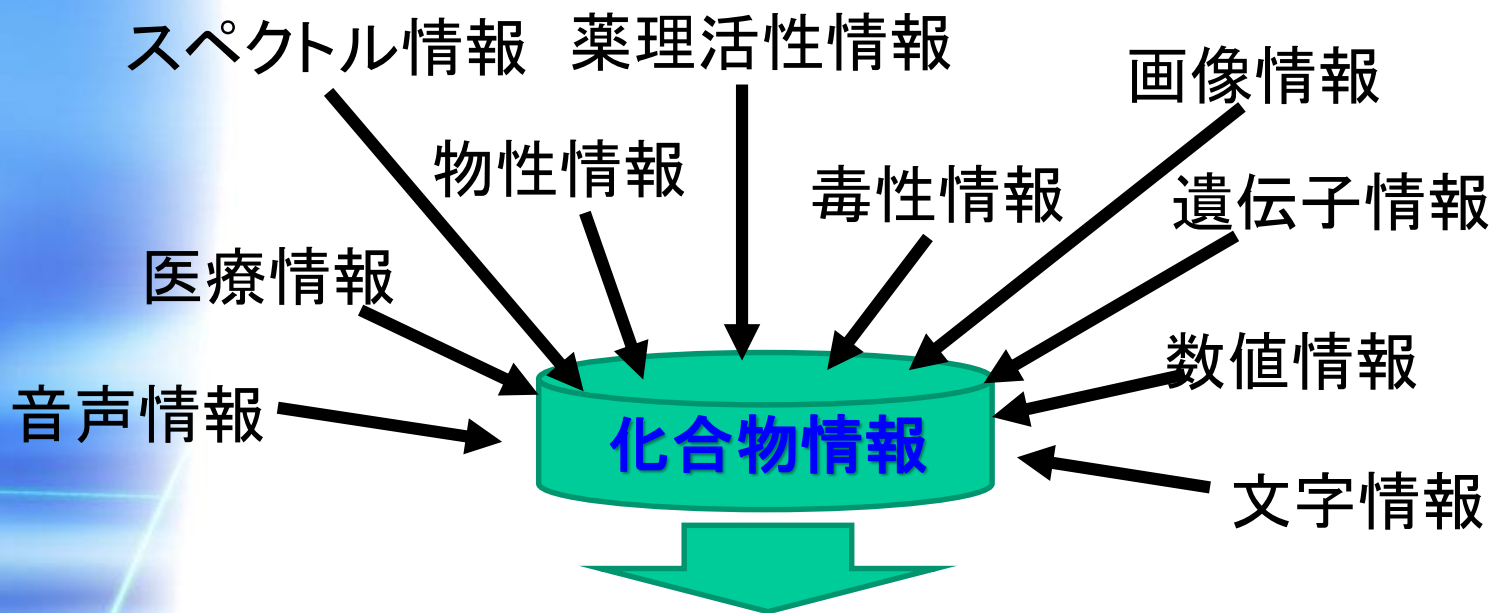
化学データサイエンス

化学多変量解析
パターン認識

AI(人工知能)

コンピューター

□ 多様な情報、システム、解析ソフト、DB等

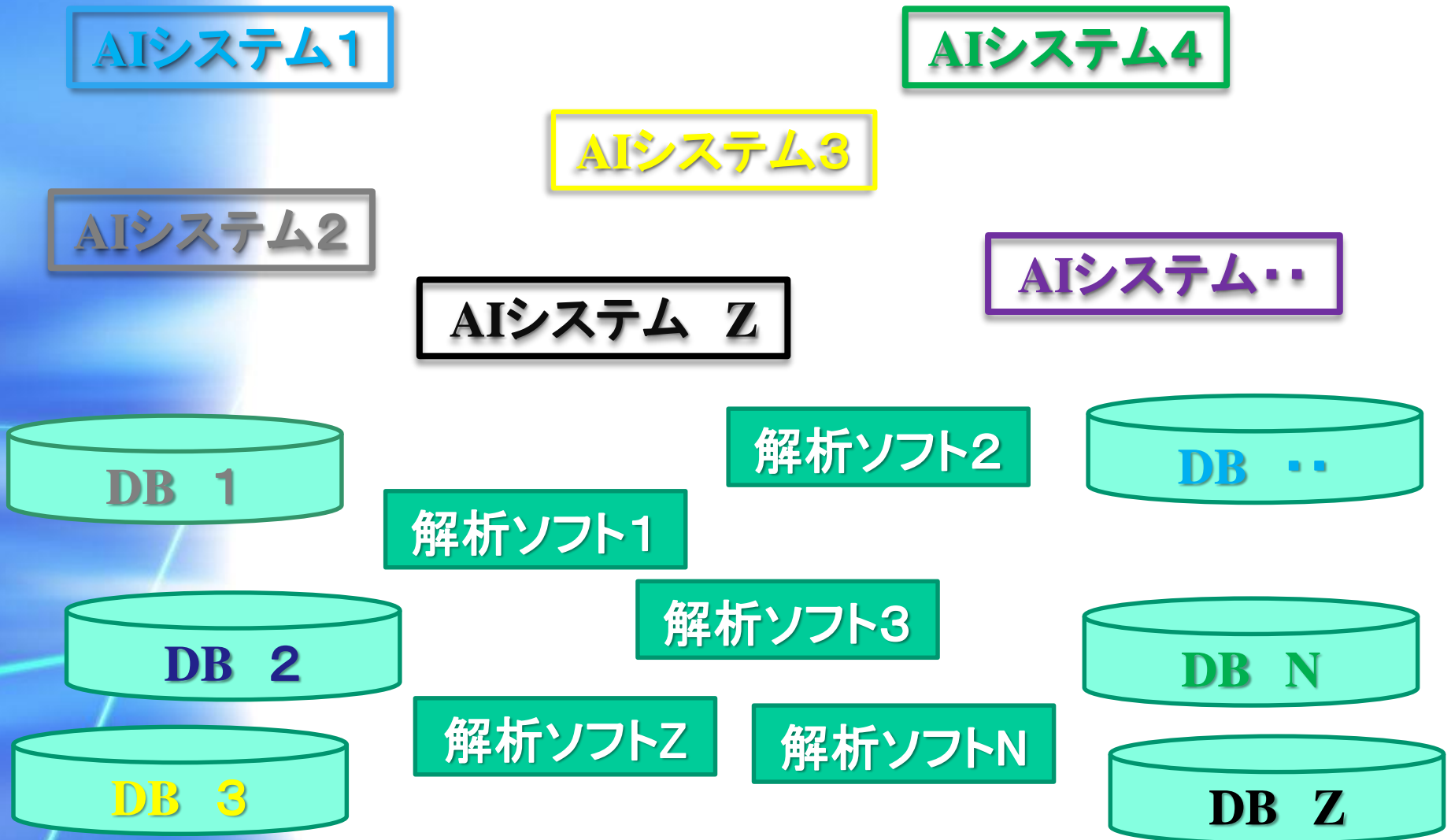


化学データサイエンス

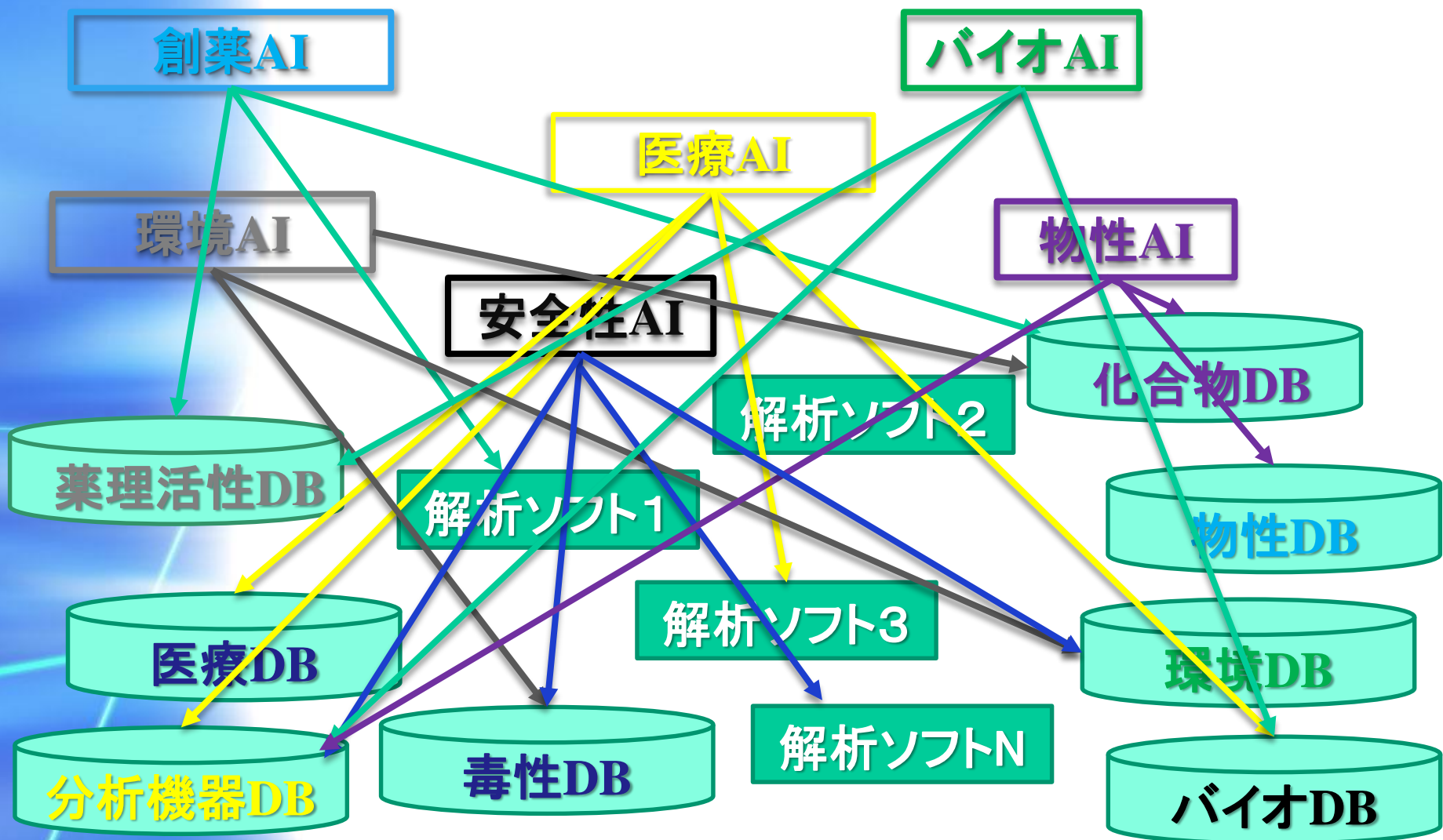
化学多変量解析
 パターン認識

AI(人工知能)

□ 多様なAIシステム、解析ソフト、データベース等



多様なAIシステム、解析ソフト、データベース等



□多様なAIシステム、解析ソフト、データベース等

長所:

1. 個々のシステムは最高のパフォーマンスを出しやすい
2. システムサイズは小さいことが多く開発しやすい

欠点、限界:

1. より高度／複雑な研究や機能を求めることは困難
2. システム間の連携が困難
3. 新機能システムは新規作成が必要(再利用は困難)
4. 研究等の変化に対応する事は極めて困難(使い捨てとなる)

□未来化学データサイエンスシステム

総合研究実施
AIロボット

将来

より高度なAI研究
臨機応変にAI研究適用
複数AI研究のまとめ

現状

- ・多種多様のAIシステム
- ・多種多様のデータサイエンスシステム
- ・多種多様のビッグデータベース

□現状のシステム環境

AIシステム1

AIシステム3

AIシステム4

AIシステム2

AIシステム..

AIシステム Z

総合研究実施
AIロボット

DB 1

解析ソフト1

解析ソフト2

DB ..

DB 2

解析ソフト3

解析ソフトN

DB N

DB 3

解析ソフトZ

DB Z

多種多様な解析テーマに、
配下のAI、解析ソフト、
データベースを能動的に適用

解析
テーマ1

解析
テーマ2

解析
テーマ・

解析
テーマZ

総合研究実施
AIロボット

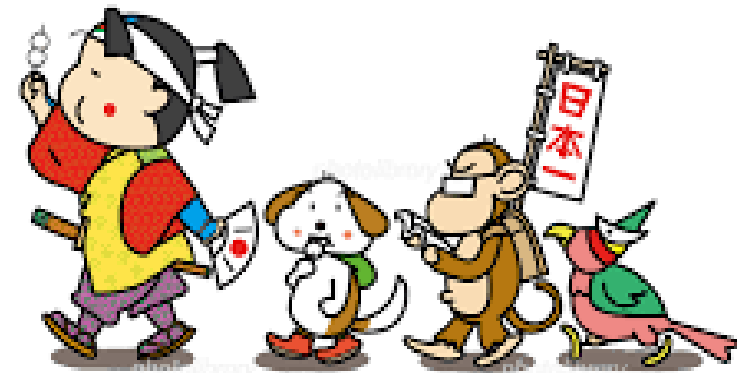
AIシステム

解析ソフト

DB

□AIを駆使して鬼退治と宝箱ゲット

総合
AIロボット



新テーマ
実現

連携問題等

AIシステム

ビッグデータ

データサイエンス



ご清聴ありがとうございました

株式会社 インシリコデータ
湯田 浩太郎