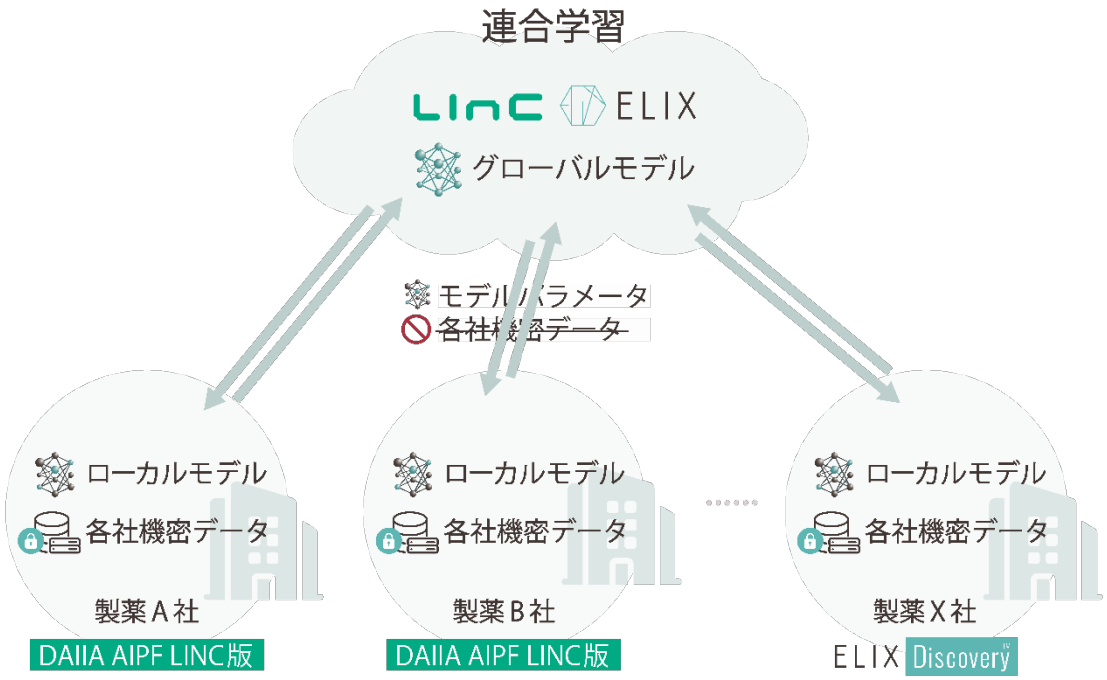
PRESS RELEASE

2025 年 7 月 8 日

LINC と Elix、製薬企業 16 社のデータを連合学習した AI モデルを搭載する AI 創薬プラットフォームを世界で初めて事業化

一般社団法人ライフ インテリジェンス コンソーシアム（代表理事：奥野 恭史、本部：大阪市北区、以下「LINC」）と、株式会社 Elix（代表取締役 CEO：結城 伸哉、本社：東京都千代田区、以下「Elix」）は、製薬企業 16 社が保有するデータを連合学習した複数の AI モデルを搭載する AI 創薬プラットフォームを、世界で初めて事業化しましたのでお知らせいたします。



（連合学習のイメージ図）

AI 創薬の鍵は、高品質かつ十分量のデータにあります。優れた AI モデルを構築するには多様で豊富なデータが欠かせませんが、製薬企業は基本的に自社が保有するデータ及び限られた公共データしか利用できず、データ不足が大きな障壁となってきました。その課題を解決したのが連合学習の技術です。

国立研究開発法人日本医療研究開発機構（以下「AMED」）の創薬支援推進事業・産学連携による次世代創薬 AI 開発（以下「DAIIA」）[*1]において、Elix は京都大学大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野と連携し、連合学習ライブラリ「kMoL」[*2]を開発しました。このライブラリを活用し、京都大学は公共データに加えて製薬企業 16 社が保有するデータを外部に開示することなく学習させた「化合物プロファイル予測 AI」を開発いたしました。

この「化合物プロファイル予測 AI」は、同じく DAIIA で開発した「新規化合物提案 AI」とともに「DAIIA AIPF LINC 版」及び Elix が開発・運用する AI 創薬プラットフォーム「Elix Discovery™」上に搭載されています。

DAIIA において培われた革新的なモデルと仕組みを継続的に運用・発展させるため、DAIIA 参画企業の多くが参加しライフサイエンス分野の AI に関する産学連携支援を行う LINC と、すでに自社で AI 創薬プラットフォームを運営している Elix が協力し、2025 年 4 月以降、順次世界初の事業化を開始する運びとなりました。今後、この事業化を通じて創薬現場での導入がさらに進むことが期待されています。

なお、事業化の開始時点では DAIIA に参画していた製薬企業が主な利用対象となりますが、参加企業が増えるほど提供データの拡充が進み、すべての利用企業にとって AI モデル群の精度と利便性が一層高まる仕組みです。今後は DAIIA に未参画の企業に対しても積極的に門戸を開く予定ですので、本取り組みにご関心をお持ちの企業の皆様は、下記お問い合わせ先よりお気軽にご連絡ください。

用語解説：

（*1）DAIIA

AMED DAIIA（Development of a Next-generation Drug Discovery AI through Industry-Academia Collaboration）の研究開発課題名「最先端の AI 技術を用いたマルチターゲット予測と構造発生を組み合わせた包括的な創薬 AI プラットフォームの開発」（研究代表者：理化学研究所　本間光貴）において、AI 技術を活用した創薬支援基盤の構築を目的に、製薬企業 17 社のほか、理化学研究所、京都大学、名古屋大学などの研究機関や AI 技術を有する IT 企業約 10 社が参画して、2020 年 8 月から 2025 年 3 月まで実施されました。

https://www.amed.go.jp/program/list/11/02/001_02-04.html

（*2）kMoL

創薬・ライフサイエンス分野における分子を対象とした機械学習モデル構築のためのライブラリで、公開されている AI 創薬向けライブラリとしては唯一、連合学習の機能を有しています。

https://www.elix-inc.com/jp/news/newsrelease/1412/

本件に関するお問い合わせ先：
一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム事務局
Tel：06-6359-1322　E-mail：*linc-jimu@linc-ai.jp*
株式会社 Elix 広報担当
Tel: 03-5357-1880　E-mail: *info@elix-inc.com*

Elix 代表取締役 CEO 結城 伸哉からのコメント：

AI 創薬においては、依然としてデータ不足が最も大きな課題の一つとされています。弊社と京都大学大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野が共同で開発してきた連合学習技術を用い、化合物構造などのデータの秘匿性を保ったまま、製薬企業 16 社が有するデータを活用して学習できる仕組みを実現してまいりました。

このたび構築した予測モデルを AI 創薬プラットフォームに搭載し、事業化するという取り組みは、世界的に見ても初の試みとなります。本プロジェクトに関わってきた製薬企業、アカデミア、AMED、LINC、そして AI/IT 企業が一丸となって取り組んだからこそ実現したものであり、製薬業界における AI 活用を新たなステージへと進める重要なマイルストーンです。これを機に、「Elix Discovery™」がデファクト・スタンダードの AI 創薬プラットフォームになっていくと考えています。

連合学習を活用したこの取り組みは、さらなる発展への新たな出発点です。今後は、より多くの製薬企業の参画とデータ拡充を促し、取り組みを一層発展・強化させることで、製薬業界全体への貢献を高めるとともに、最終的には患者様への恩恵につなげてまいります。

DAIIA 研究代表者 理化学研究所 生命医科学研究センター 制御分子設計研究チーム チームディレクター 本間 光貴からのコメント：

このたび、AMED DAIIA プロジェクトの成果であるオン・オフターゲット予測 AI、ADMET 予測 AI、ならびに生成 AI が、LINC および Elix 社により事業化される運びとなり、大変うれしく思います。

DAIIA の予測 AI は、製薬企業から提供された化合物の構造式データをもとに構築されており、100 万化合物、1,000 万ポイント以上に及ぶ構造付きデータによる学習は、世界的にも前例のない規模です。学習は、安定して連合学習を実施できる専用システムにより実現されており、機密性を担保しつつ、協調的なモデル構築が可能となっています。

また生成 AI については、ChemTS を発展させ、多目的最適化を効率的に行う DyRAMO などの高度な機能を搭載する予定です。これにより、新規化合物の創出とその活性等のプロファイル評価が、これまで以上に高精度かつスピーディに行えるようになります。

連合学習や生成 AI といった技術の活用においては、継続的なアップデートが不可欠です。今回の事業化によって、DAIIA の成果が継続的に発展し、製薬企業向けのソフトウェアとして長期的に提供されることで、創薬研究の加速と革新に大きく寄与することを期待しています。

DAIIA 研究分担者　LINC 代表理事 兼 京都大学 大学院医学研究科 人間健康科学系専攻 ビッグデータ医科学分野 教授 兼 理化学研究所 計算科学研究センター HPC／AI 駆動型医薬プラットフォーム 部門長 奥野 恭史からのコメント：

このたび、AMED プロジェクトの事業化に際し、AMED ならびにご協力いただいた製薬企業の皆様に心より感謝申し上げます。

本事業化には二つの大きな意義があります。第一に、多くの国のプロジェクトが事業終了後に実用化に至らない中、本取り組みは製薬企業にご活用いただくことで、実際の創薬現場に資することです。第二に、複数の製薬企業が、今後も連合学習を通じて業界横断的にデータを共有し、高精度な AI 開発を目指す点です。通常、自社利益の追求が優先されがちな産業界において、患者さんのために各社がデータを共有し合い、高性能な創薬 AI を構築・活用しようとする取り組みは、極めて意義深く、誇り高いものと考えております。

本プロジェクトが我が国の創薬力向上の礎となり、ひいては世界中の患者さんの健康に貢献することを心より願っております。

LINC について：

ライフサイエンス分野のための AI・ビッグデータ・IoT 等のアプリケーション開発及び社会実装を行うことにより、当該分野の発展と人材育成、DX 推進、経済振興を目指すコンソーシアムです。詳細はウェブサイト（https://linc-ai.jp/）をご覧ください。

Elix について：

「創薬を再考する」をミッションとした AI 創薬企業で、創薬における膨大なコストと時間の削減及び成功率改善のために、AI・機械学習を中心に活用し、製薬企業・大学・研究機関・バイオベンチャー向けに事業を行っています。主に、「メドケムが本当に使える」をコンセプトに開発した統合型 AI 創薬プラットフォーム「Elix Discovery™」を事業展開しています。詳細はウェブサイト（https://www.elix-inc.com/jp）をご覧ください。