

NO.001 / 2024

THE LINC REPORT

～ AI と共創する創薬 ～





ABOUT LINC について

AI

× ビッグデータ × ライフサイエンス

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、経済振興を目指します。

<法人名>

一般社団法人

ライフインテリジェンスコンソーシアム
(略称 LINC)

<設立>

令和3年(2021年)1月14日

<所在地>

〒530-0011 大阪市北区大深町3-1
グランフロント大阪タワーC 7F
都市活力研究所内

<ウェブサイト>

<http://linc-ai.jp>

Contents

代表ごあいさつ	P2
LINCのワーキング紹介	P3
WG00 AI/DB基盤	P4
WG01 デジタルヘルス&メディスン・RWD解析	P5
WG02 標的探索・バイオインフォマティクス	P7
WG03 バイオロジックス・ニューモダリティ	P9
WG04 分子シミュレーション	P10
WG05 メディシナルケミストリー	P14
WG06 製剤・マテリアルインフォマティクス	P16
WG07 ADMET・トランスレーショナルリサーチ	P17
WG08 治験・市販後・メディカルアフェアーズ	P18
WG09 人材育成	P21
IT企業紹介(目次)	P22
01 株式会社CMCエクスメディカ	P23
02 株式会社Elix	P24
03 株式会社ロゼッタ	P25
04 株式会社スキルアップNeXt	P26
05 アドバンスソフト株式会社	P27
06 株式会社システム計画研究所	P28
07 fuku株式会社	P29
08 株式会社JSOL	P30
活動・成果	P31
会員リスト	P33
入会について	P35

代表 ごあいさつ



LINC 代表理事 奥野 恭史 おくの やすし

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

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
部門長

平素より LINC 活動にご協力賜り、心より御礼申し上げます。COVID-19 の影響も落ち着き、LINC の一大イベントである Showcase を大阪と東京で無事に開催できました。特に 3 月の Showcase では若手参加者が増え、大変喜ばしい限りです。また、今年 4 月 1 日の国会答弁では、文科省、厚労省、経産省の各大臣と岸田首相から、日本の創薬力向上に向けた LINC の取り組みや創薬 DX プラットフォーム構想の重要性について発言がありました。LINC としても、この期待に応えるべく、創薬をはじめとするライフサイエンス分野の DX 推進に一層力を入れてまいります。

さて、最近、ChatGPT を開発する OpenAI 社が日本にアジア拠点を開設しました。これにより、日本の AI 業界には大きな衝撃が走っています。では、ChatGPT がこれほど注目される理由は何でしょうか。それは、大規模言語モデル研究において、AI が創発性を示し始めた点にあります。従来の AI は学習データに基づいて賢くなるとされてきましたが、大規模言語モデルでは、学習データ量に比例せず、ある閾値を超えた瞬間に解けなかった問題を急に解けるようになる現象が観察されています。これが AI の創発性です。

AI の創発性は、科学における偶然の発見を必然に変える可能性を秘めています。このような創発的能力をもつ AI は、研究のやり方そのものを変革し、科学の進化に革命をもたらす可能性があります。例えば、世界中の論文やデータを毎日学習する AI が創発的に新規物質や現象を予測し、その実験検証をロボットが自動に行い、その実験結果を AI が解釈・論文執筆を行う自動サイクルの実現が期待されます。そうなれば、科学者が自ら思考し実験するだけでは AI やロボットには勝てず、科学の進展に関与できなくなるかもしれません。これがシンギュラリティを迎えた世界と言えるでしょう。ChatGPT の出現により、このような未来が現実味を帯びてきたのです。

もちろん、技術的、制度的、倫理的な課題は依然として多く残されています。しかし、私たち LINC は、多くの患者のために疾患を克服するという使命を常に胸に刻み、前進し続けなければなりません。