

AI技術を用いた医薬品分子設計



代表取締役 CEO
Ryu Ogawa, Ph.D.

PROBLEM TO TACKLE

有効な治療薬のない疾患

30,000+



R&D COST

1000億円

/ drug



PROCESS

5-10年



PROBABILITY

1/20,000

PROBLEM TO TACKLE

有効な治療薬のない疾患

30,000+



R&D COST

1000億円

/ drug



PROCESS

5-10年



PROBABILITY

1/20,000

PROBLEM TO TACKLE

有効な治療薬のない疾患

30,000+



R&D COST

1000億円

/ drug



PROCESS

5-10年



PROBABILITY

1/20,000

PROBLEM TO TACKLE

有効な治療薬のない疾患

30,000+



R&D COST

1000億円

/ drug



PROCESS

5-10年



PROBABILITY

1/20,000

PROBLEM TO TACKLE

有効な治療薬のない疾患

30,000+



R&D COST

1000億円

/ drug



PROCESS

5-10年

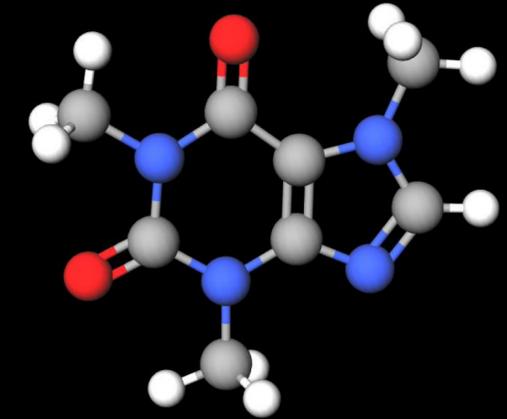
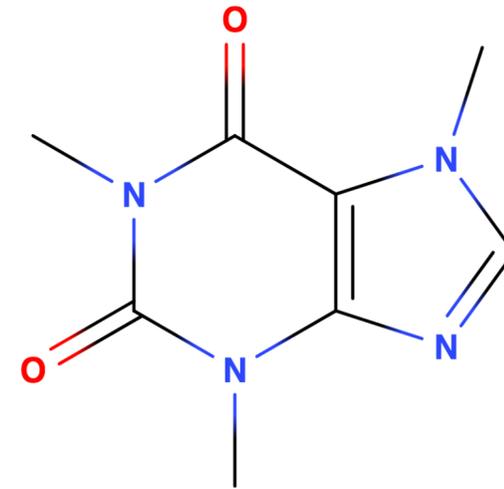


PROBABILITY

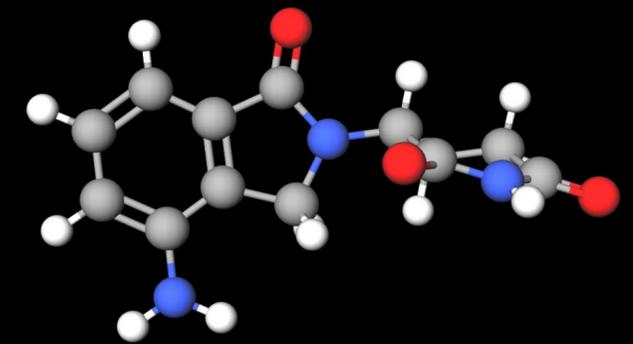
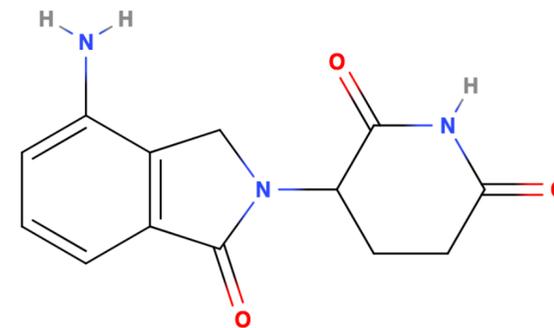
1/20,000

分子の構造(カフェイン、低分子医薬品)

カフェイン



低分子抗癌剤:レナリドミド



近年の医薬品(バイオ医薬品 = 中分子・高分子医薬品)

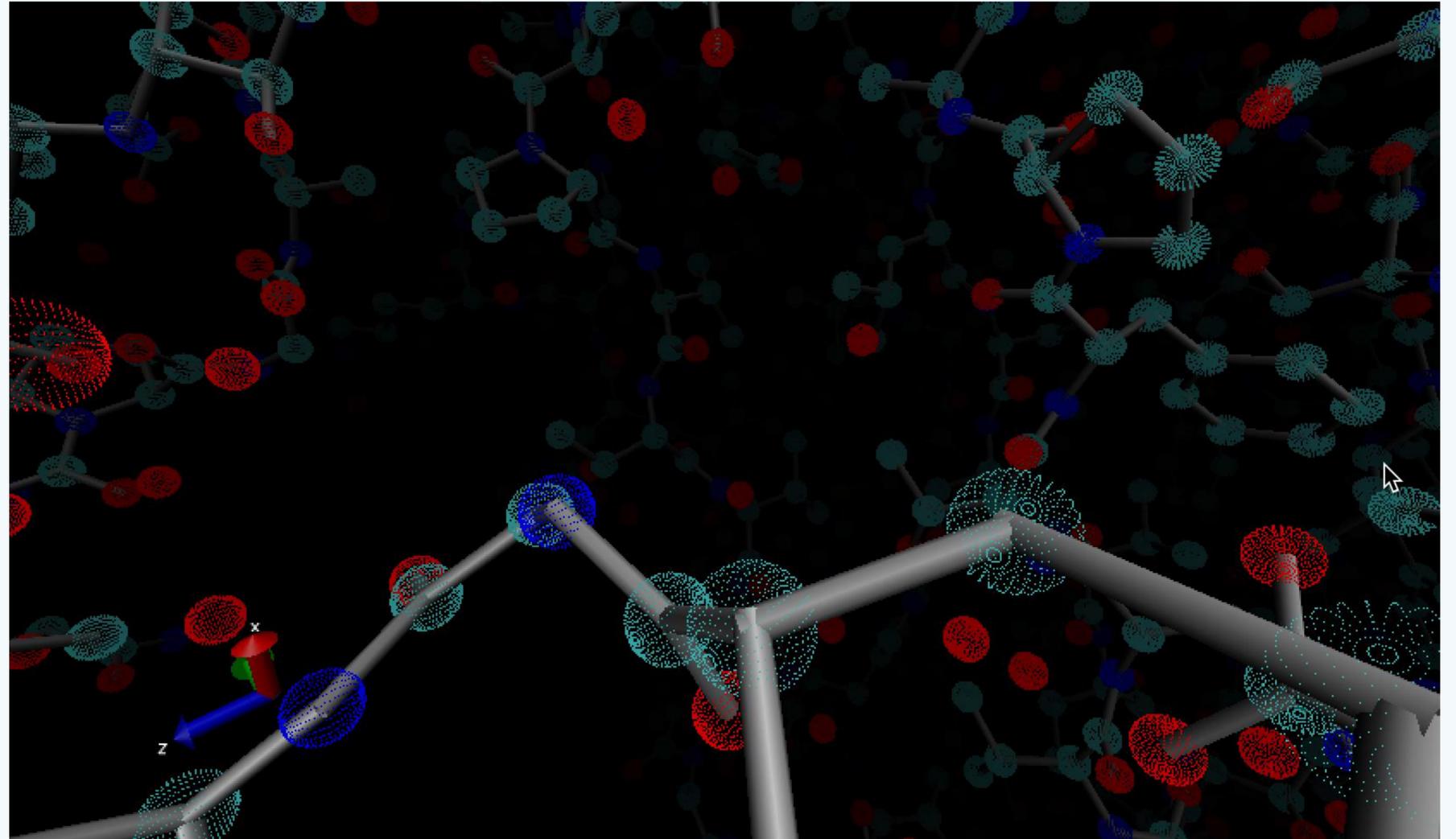
抗癌剤(バイオ医薬品):リツキサンの

近年の医薬品(バイオ医薬品)は

巨大

かつ

複雑



近年の医薬品(バイオ医薬品 = 中分子・高分子医薬品)

抗癌剤(バイオ医薬品):リツキサンの

近年の医薬品(バイオ医薬品)は

\$240B

2018

かつ

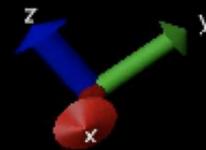
複雑

10%

CAGR

\$380B

2024 (forecast)



近年の医薬品(バイオ医薬品 = 中分子・高分子医薬品)

抗癌剤(バイオ医薬品):リツキサンの

近年の医薬品(バイオ医薬品)は

\$240B

2018

かつ

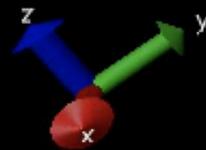
複雑

10%

CAGR

\$380B

2024 (forecast)



近年の医薬品(バイオ医薬品 = 中分子・高分子医薬品)

抗癌剤(バイオ医薬品):リツキサソ

近年の医薬品(バイオ医薬品)は

\$240B

2018

かつ

複雑

10%

CAGR

\$380B

2024 (forecast)



近年の医薬品(バイオ医薬品 = 中分子・高分子医薬品)

抗癌剤(バイオ医薬品):リツキサソ

近年の医薬品(バイオ医薬品)は

\$240B

2018

かつ

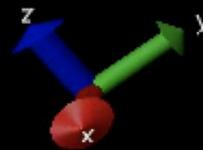
複雑

10%

CAGR

\$380B

2024 (forecast)



MOLCUREの会社略歴



MOLCURE は AI分子設計を実用化するために
2013年に設立された慶應発ベンチャー

東大・慶應の科学者が中心の25名程度のチーム
東京大学エッジキャピタル様などから合計5億円の出資を受けている

2018年に製薬企業向けAI分子設計サービスをローンチ
すでに国内外の大手製薬企業 6社 が創薬に使用

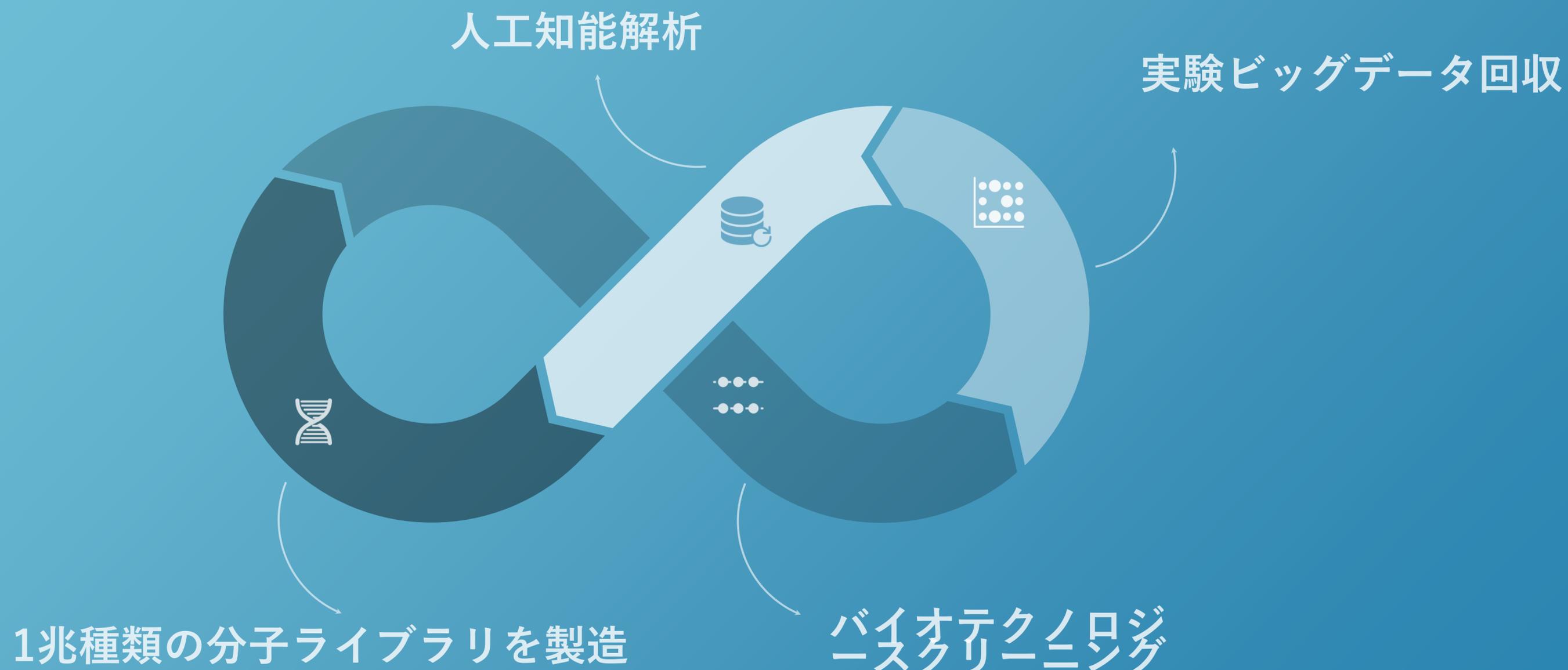


MOLCURE

SMART MOLECULE DESIGN

“WET LAB IN THE LOOP” AI

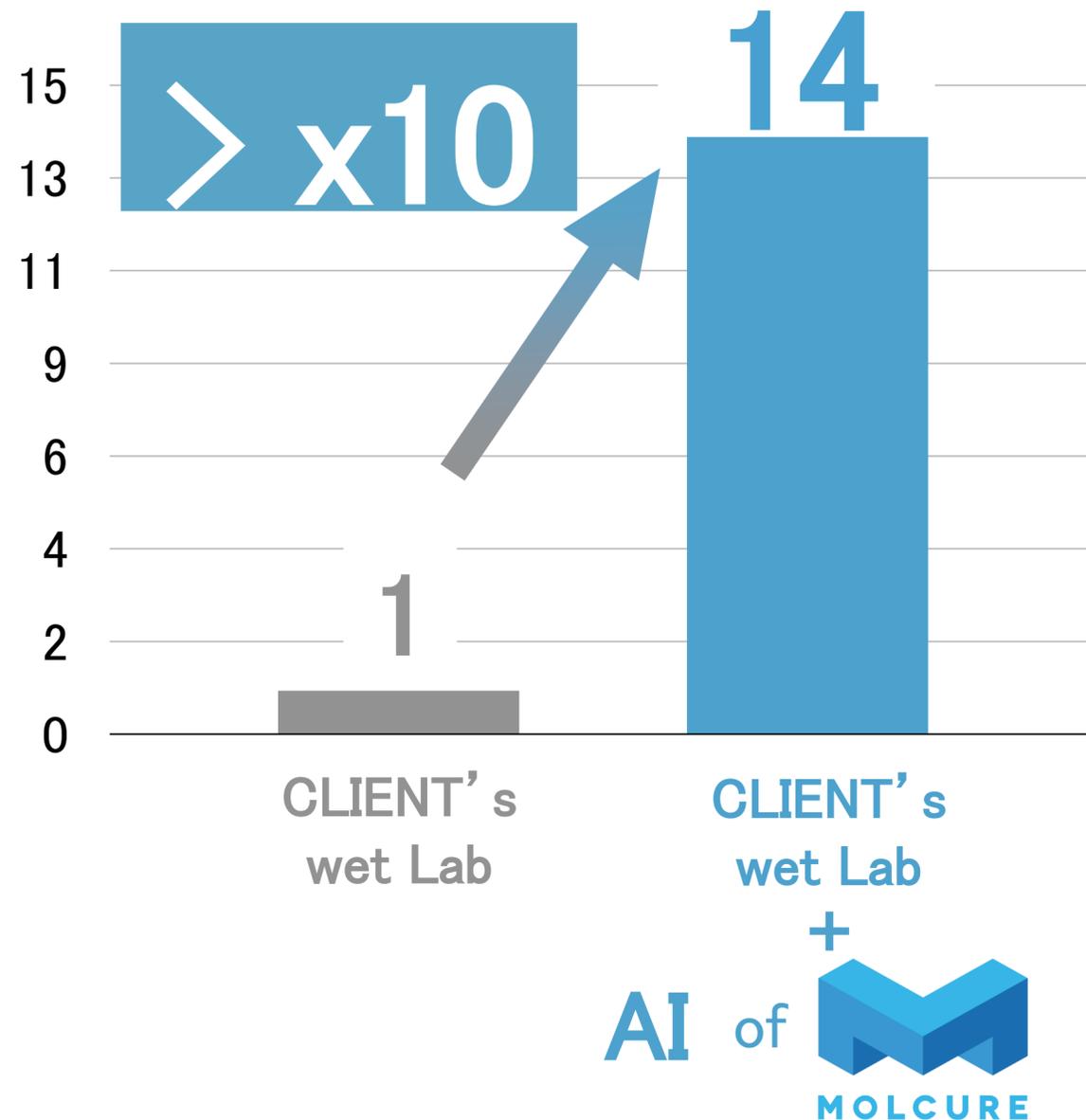
AI・バイオ実験・ロボットから構成されるループ構造を持つAI



顧客への提供価値: 顧客との事例 (抗体医薬品探索)

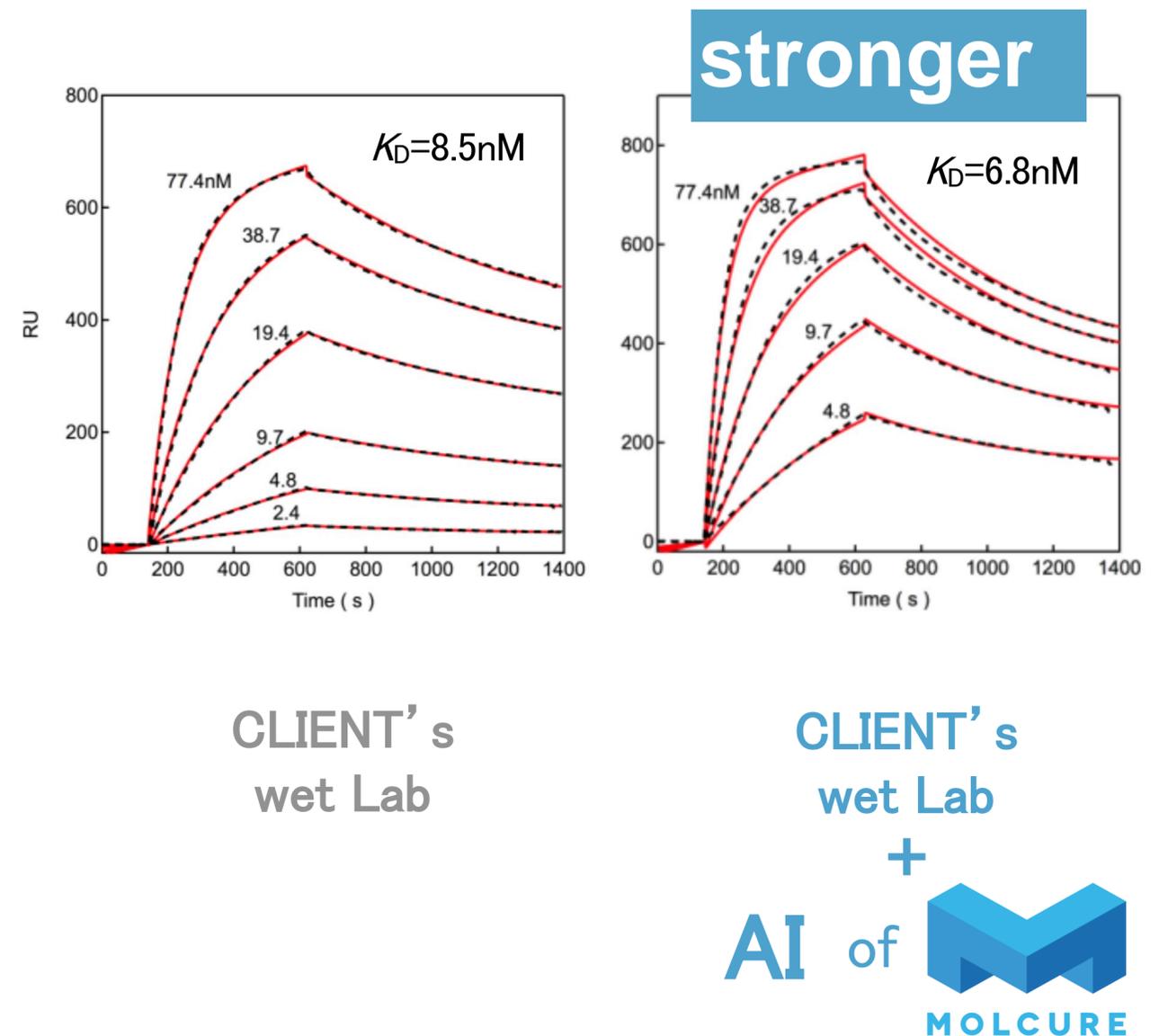
より多様な分子

より多様な骨格構造の抗体



より優れた分子

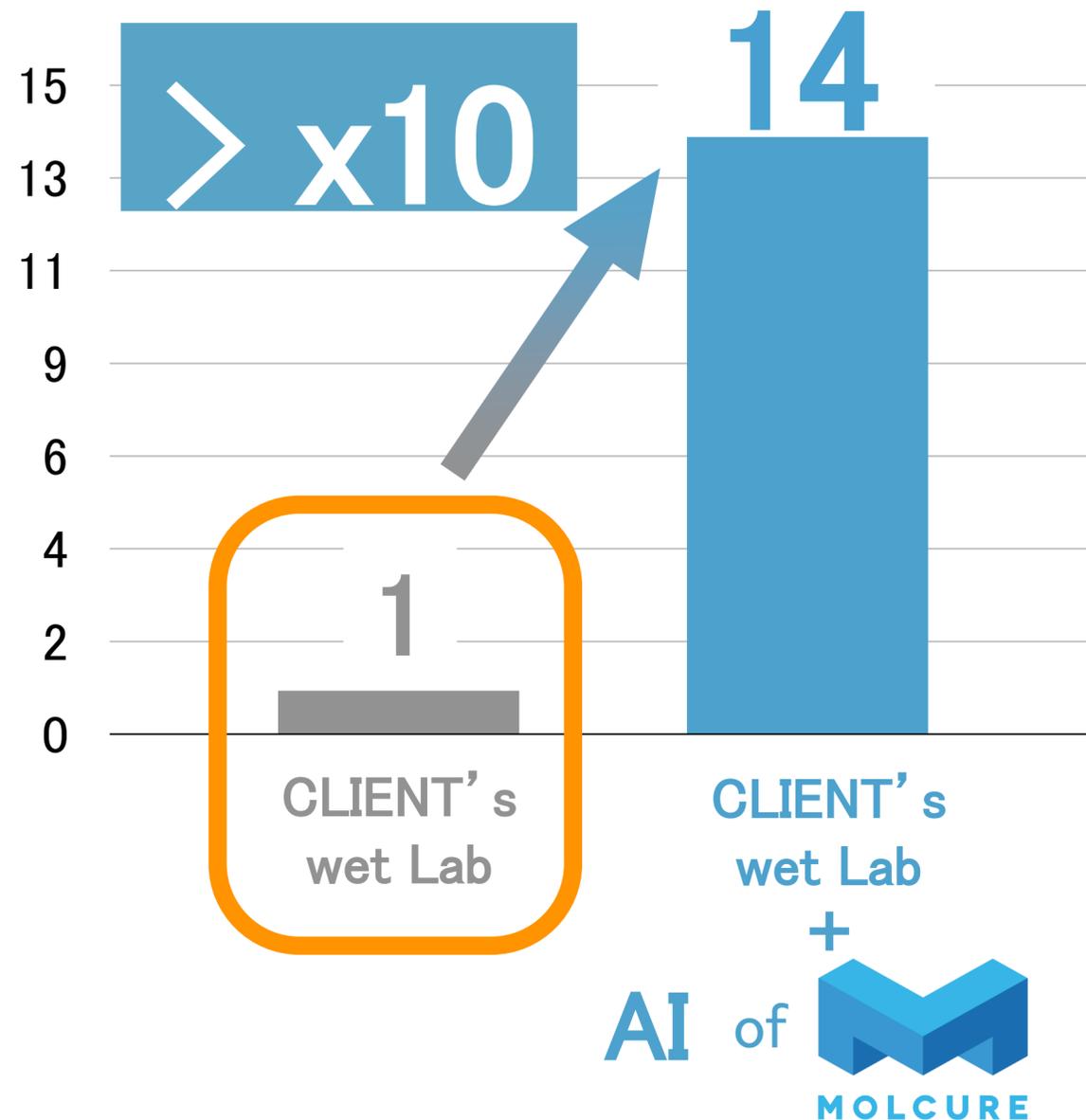
より強い結合力の抗体



顧客への提供価値: 顧客との事例 (抗体医薬品探索)

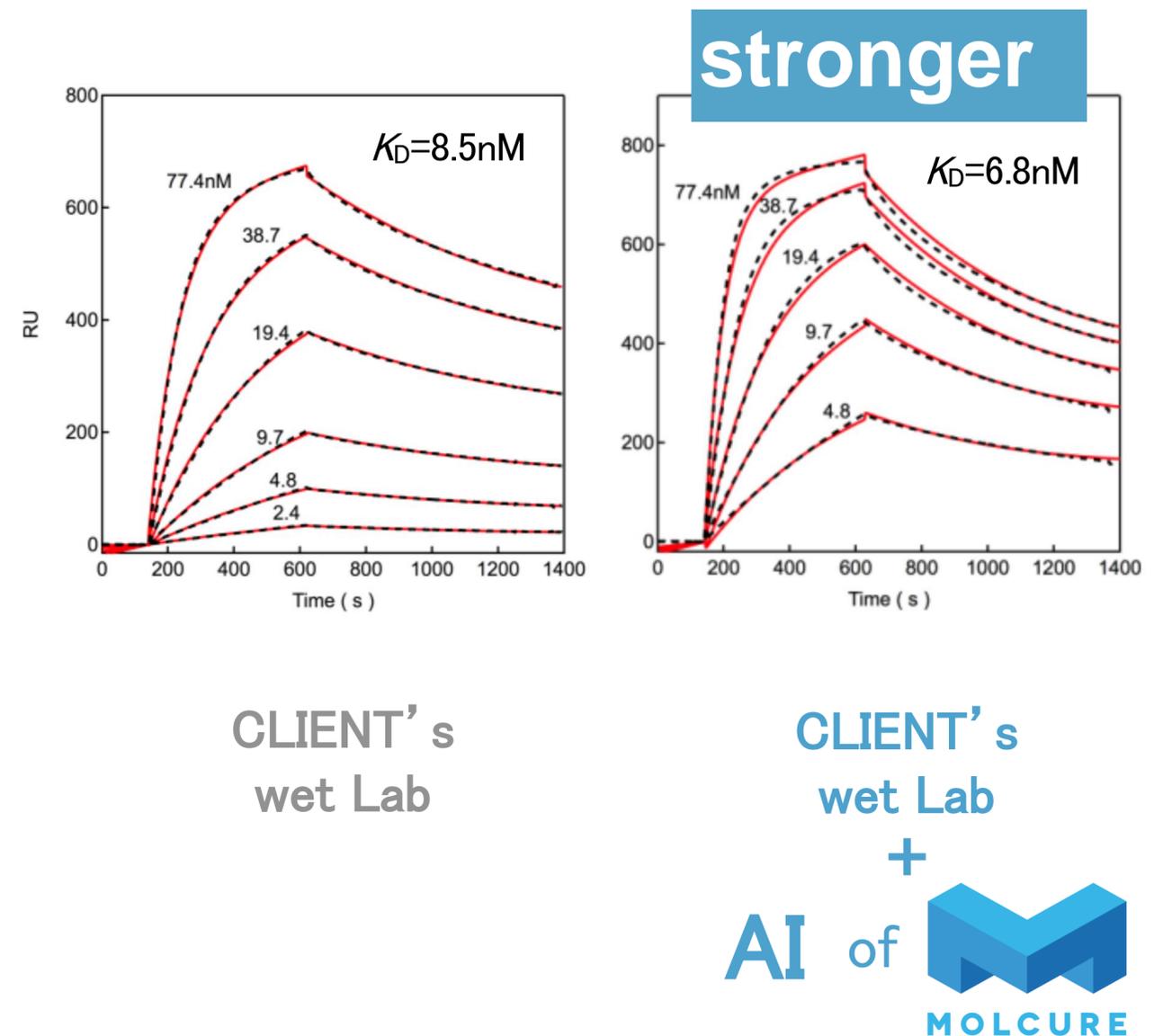
より多様な分子

より多様な骨格構造の抗体



より優れた分子

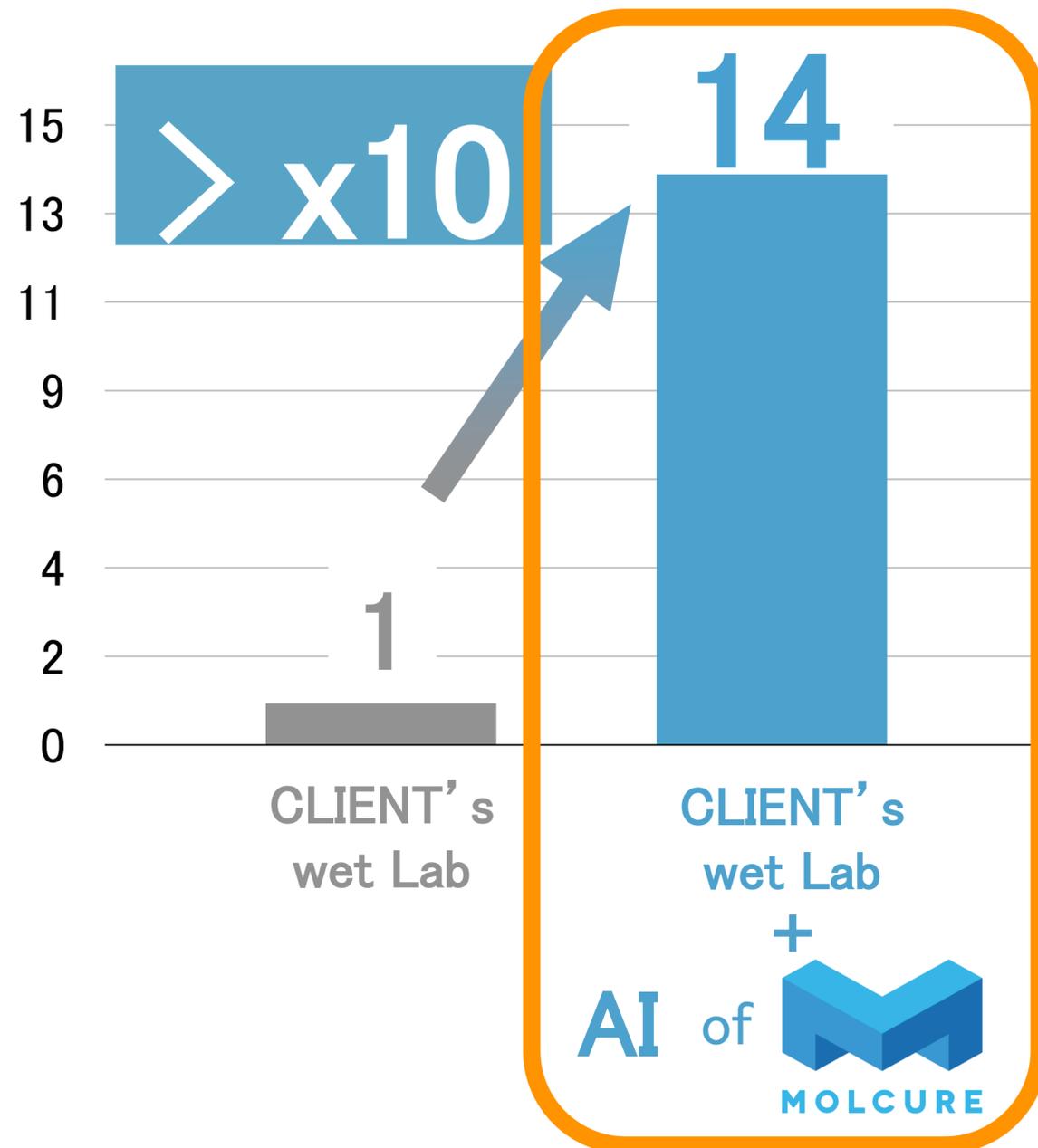
より強い結合力の抗体



顧客への提供価値: 顧客との事例 (抗体医薬品探索)

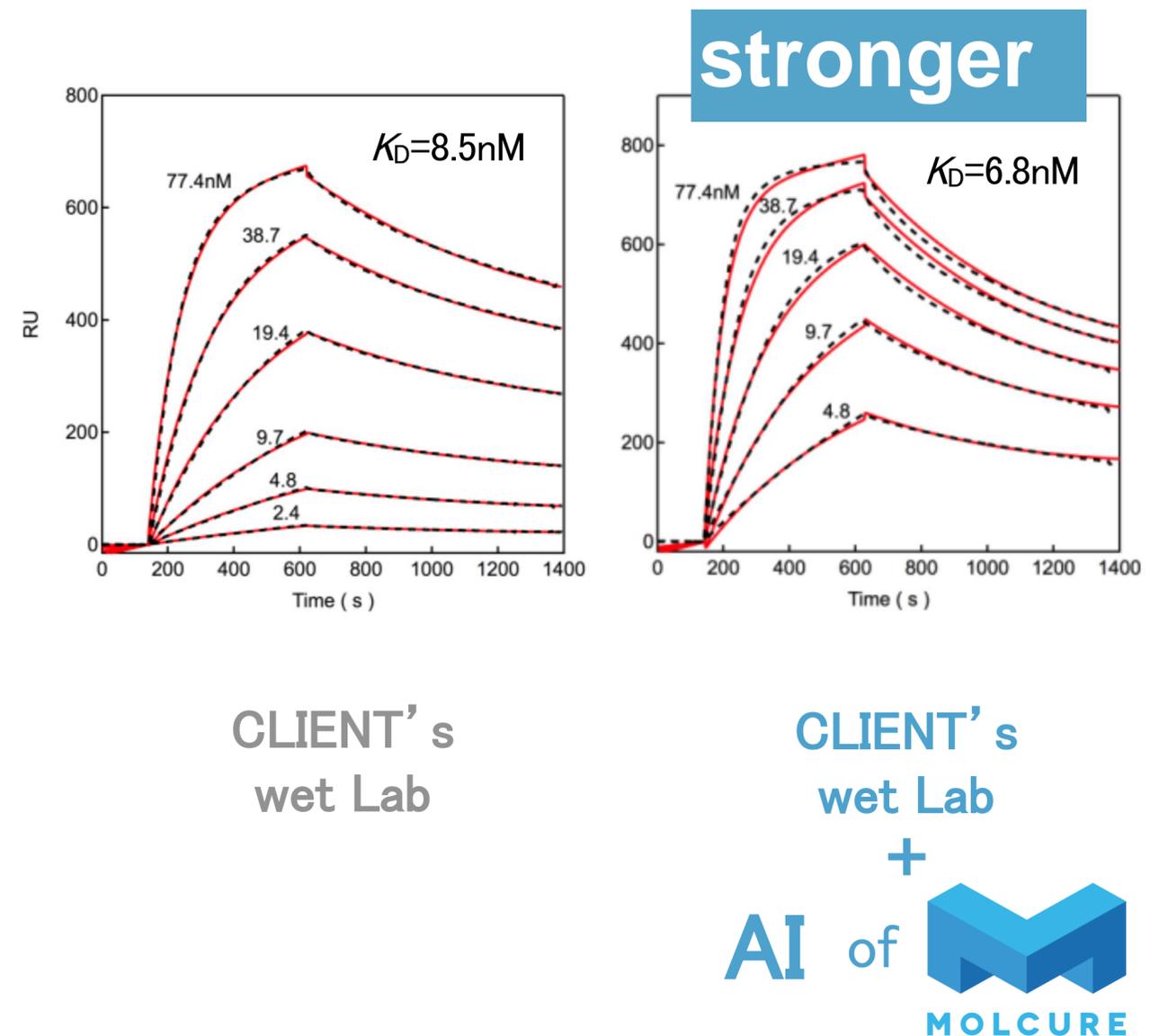
より多様な分子

より多様な骨格構造の抗体



より優れた分子

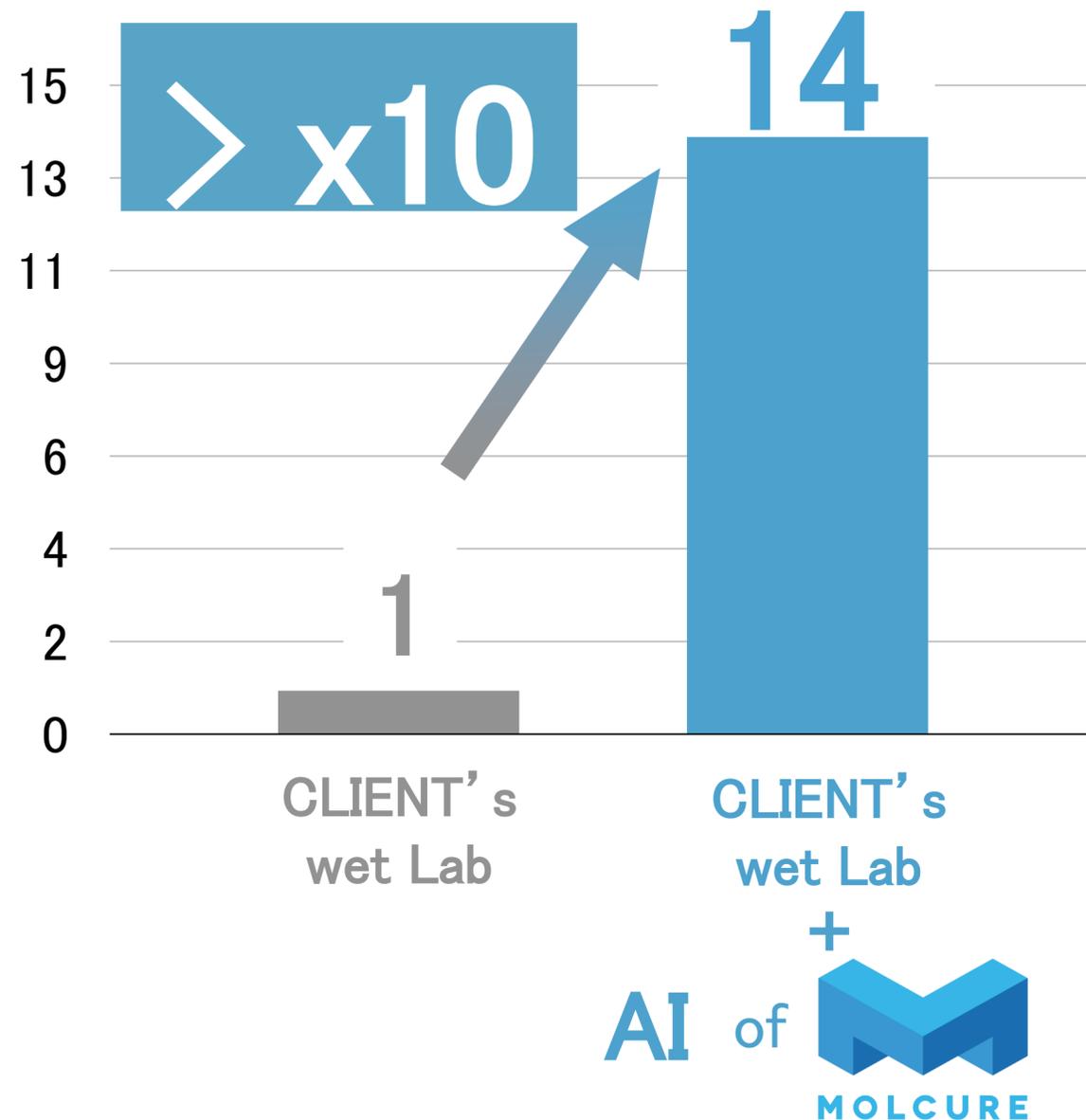
より強い結合力の抗体



顧客への提供価値: 顧客との事例 (抗体医薬品探索)

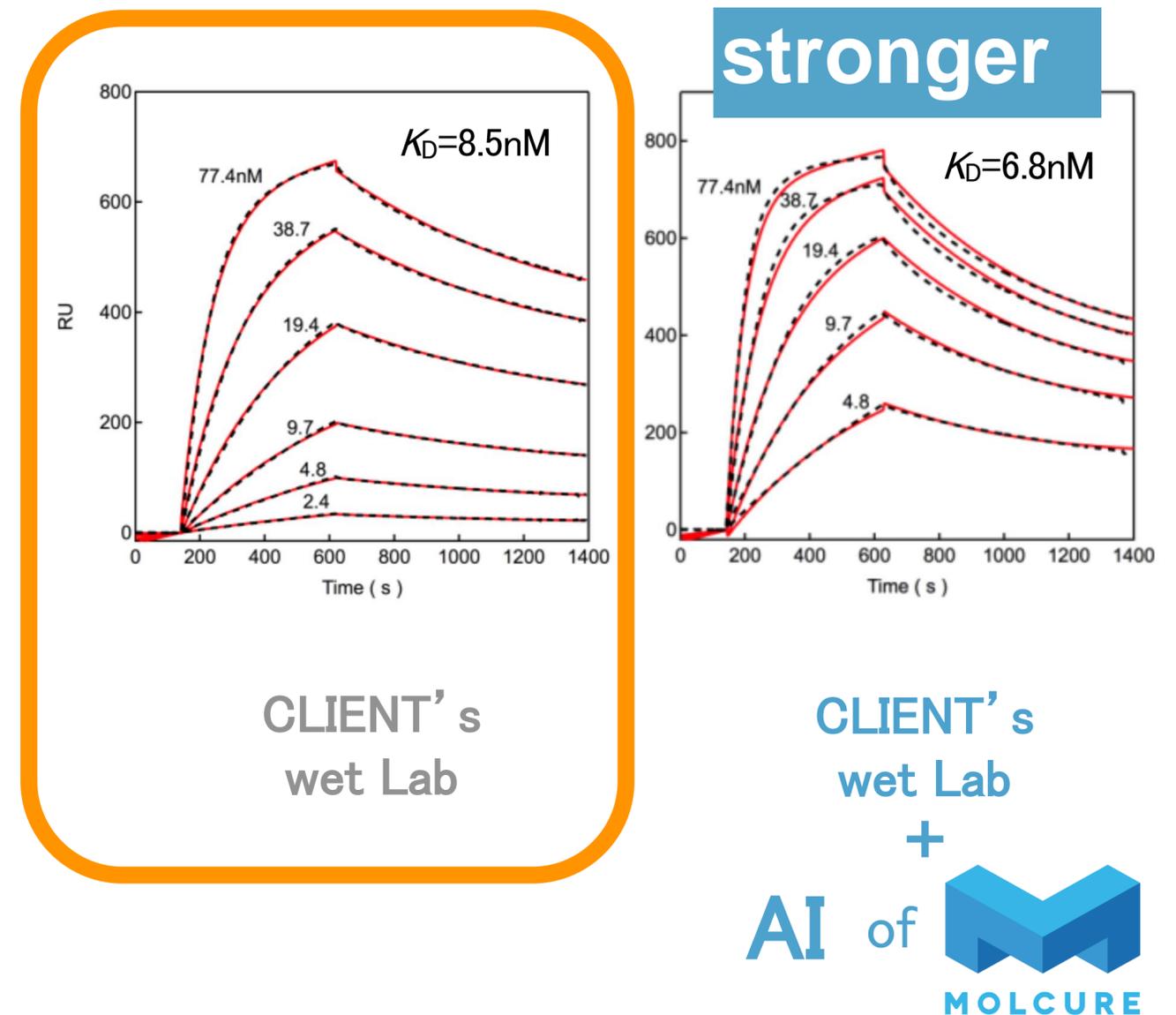
より多様な分子

より多様な骨格構造の抗体



より優れた分子

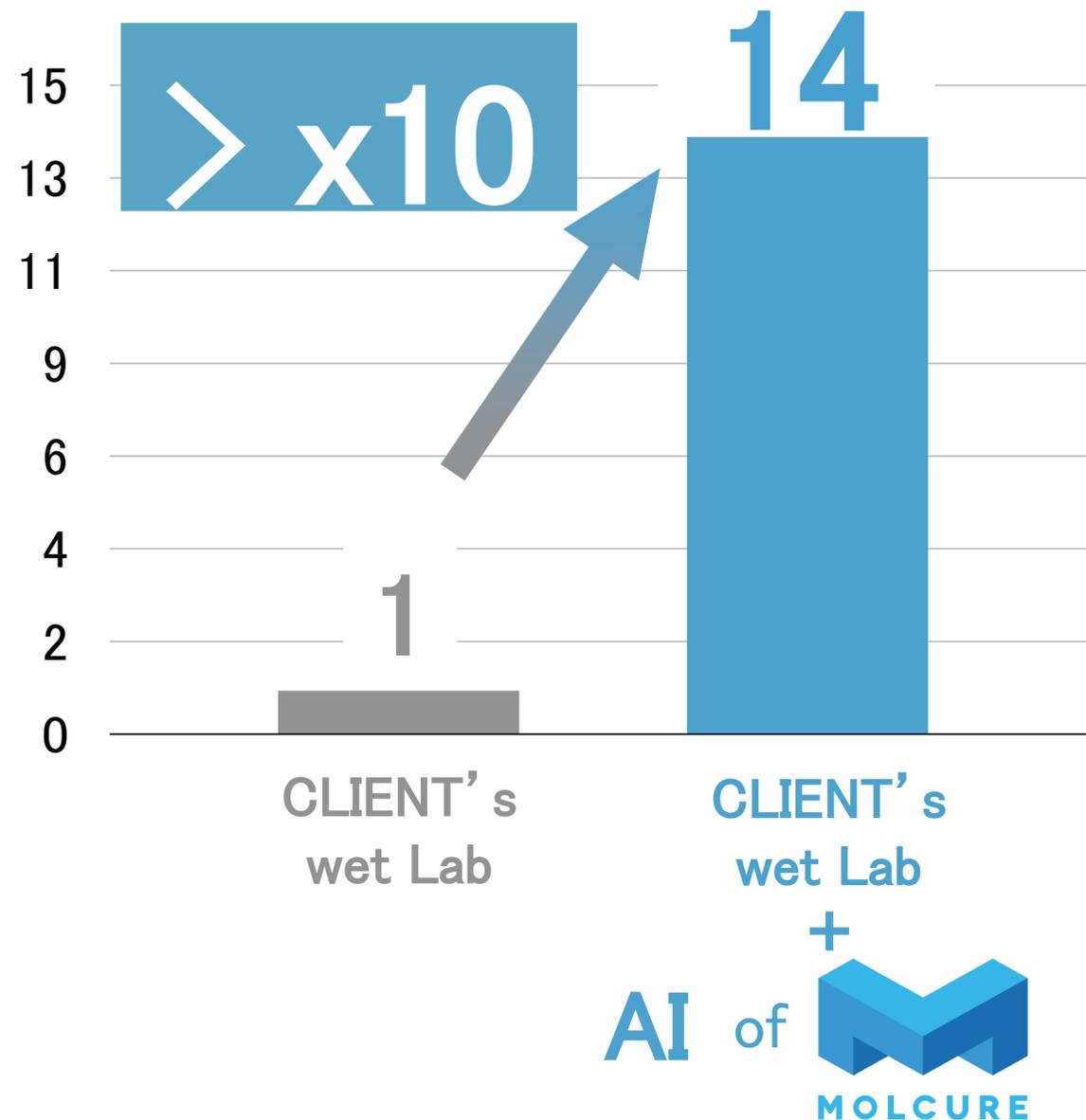
より強い結合力の抗体



顧客への提供価値: 顧客との事例 (抗体医薬品探索)

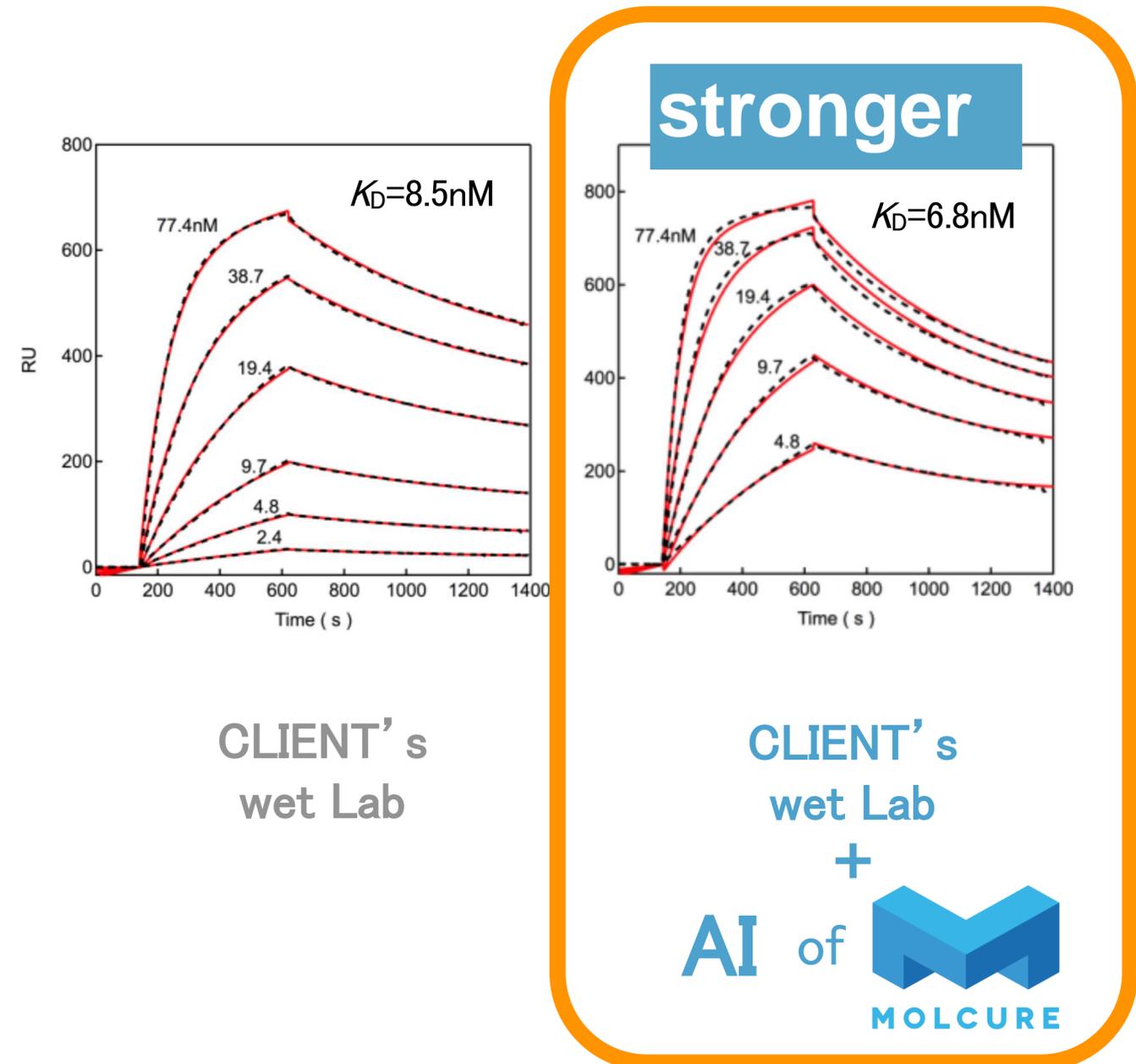
より多様な分子

より多様な骨格構造の抗体



より優れた分子

より強い結合力の抗体



MOLCUREのAIを使うメリット

既存手法では発見できない
分子を設計可能

0 → 1

より多様な構造の分子群

x10

製薬企業の研究所の成果を最大化することができる
対象の医薬品の種類: 抗体・ペプチド・核酸アプタマー

MOLCUREのAIを使うメリット

既存手法では発見できない
分子を設計可能



より多様な構造の分子群

x10

製薬企業の研究所の成果を最大化することができる
対象の医薬品の種類: 抗体・ペプチド・核酸アプタマー

MOLCUREのAIを使うメリット

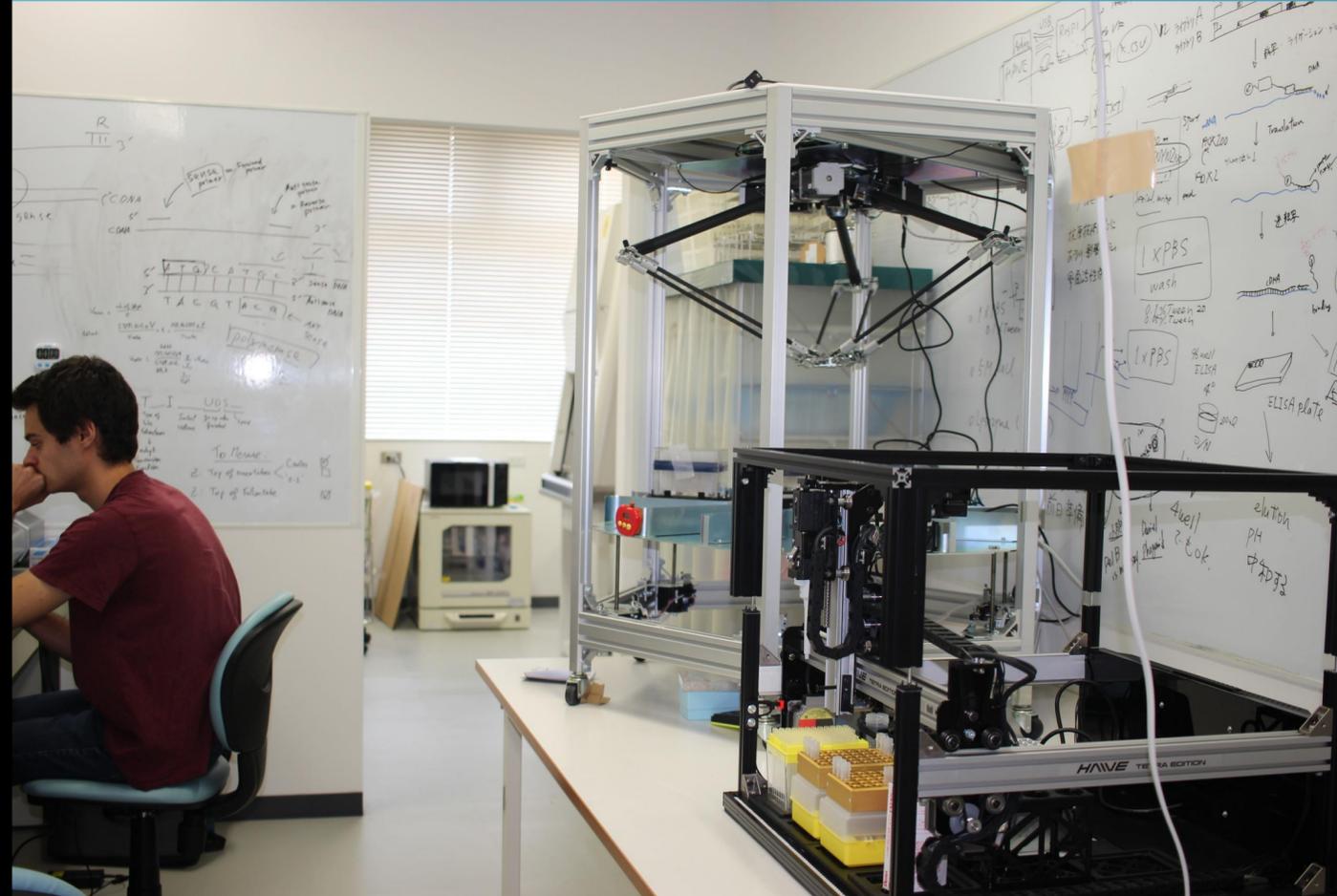
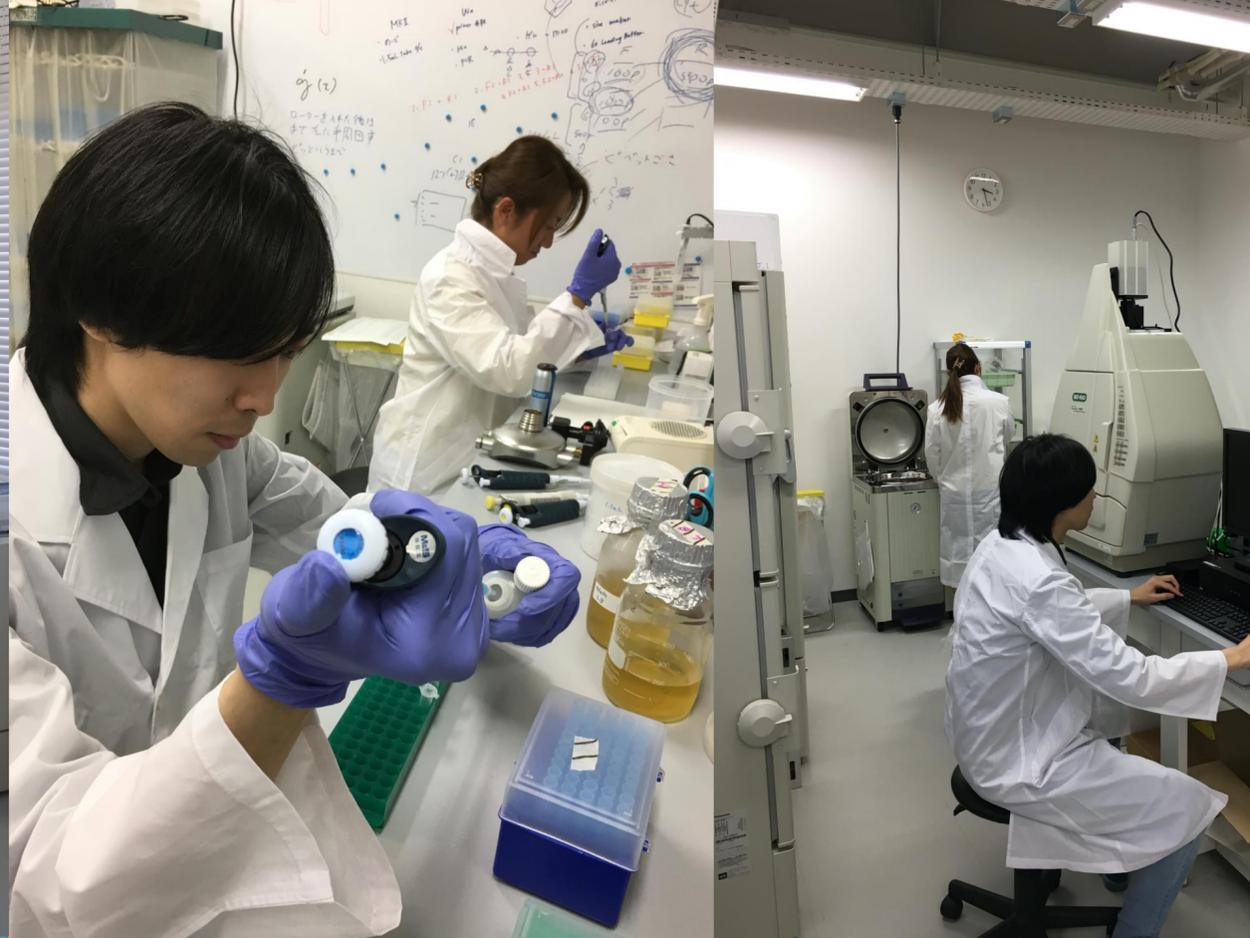
既存手法では発見できない
分子を設計可能

0 → 1

より多様な構造の分子群

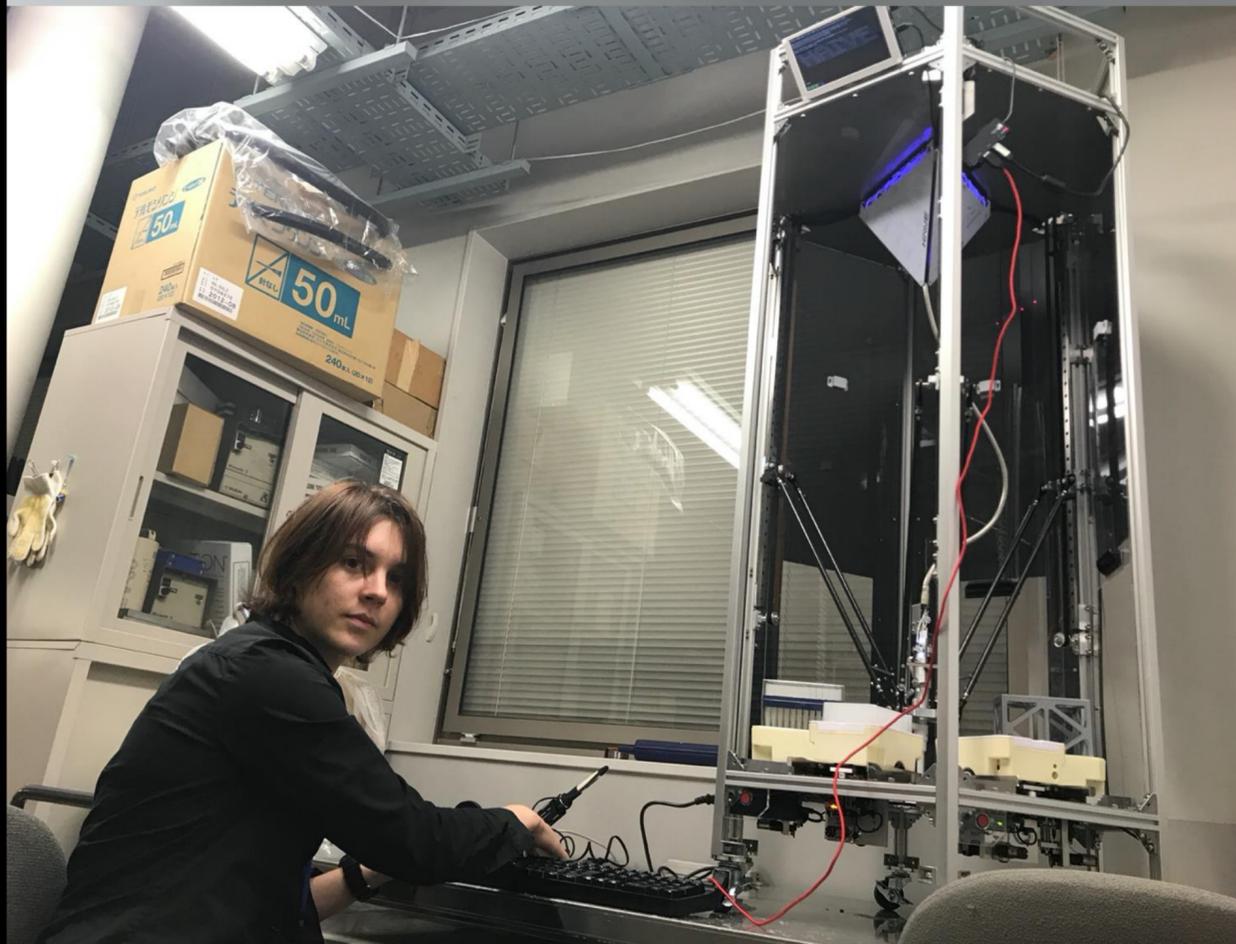
x10

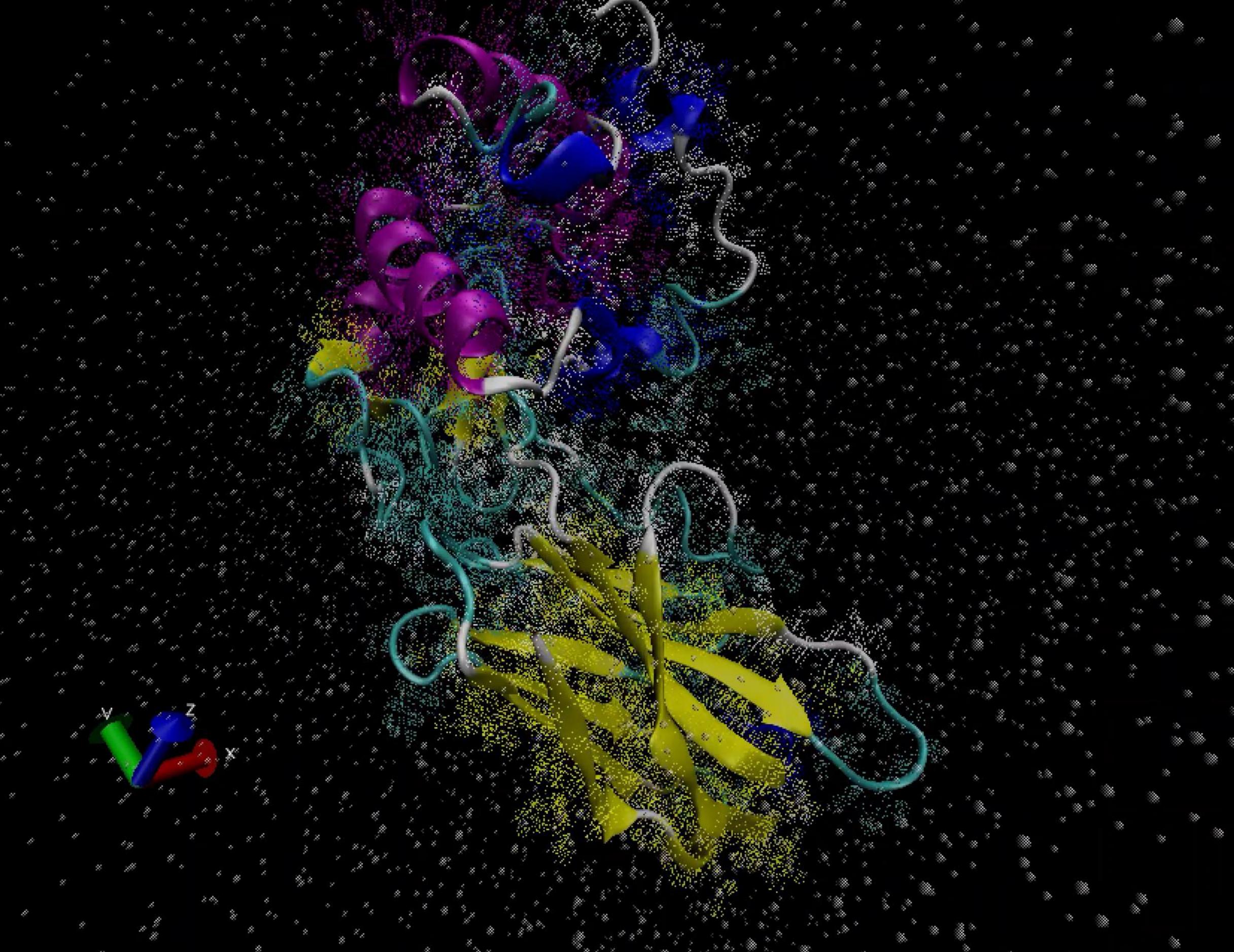
製薬企業の研究所の成果を最大化することができる
対象の医薬品の種類: 抗体・ペプチド・核酸アプタマー



バイオラボ

独自ロボットでの
実験自動化





Selected Molecule

10: main-1comp.pdb

Create Rep Delete Rep

Style	Color	Selection
Beads	Occupancy	waters
Dotted	Structure	protein
NewCartoon	Structure	protein

Selected Atoms

protein

Draw style | Selections | Trajectory | Periodic

Coloring Method Material

Secondary Stru Transparent

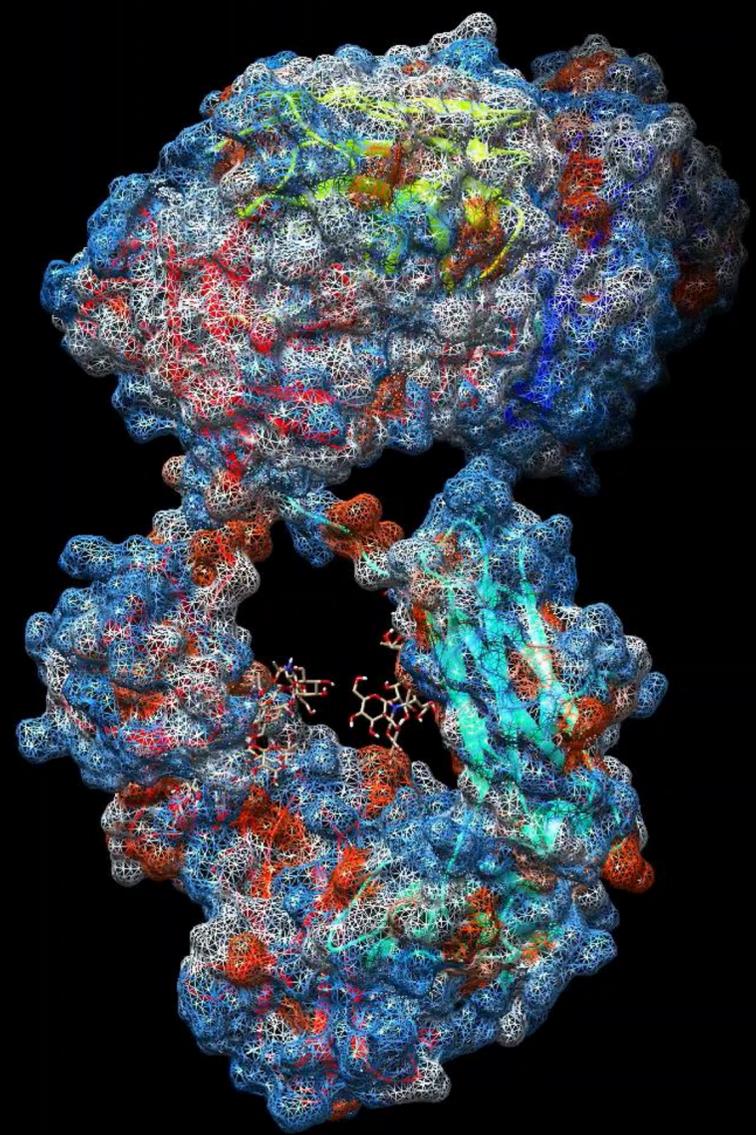
Drawing Method Default

Dotted

Sphere Scale

Sphere Resolution

◆ Apply Changes Automatically Apply



```
Rs-MacBook-Pro:~ R$ less /Users/R/NGS_data_process/VHH_HST_R1_R4/AM07C_PG1293_04A27_H1_L001_R2.fastq  
Rs-MacBook-Pro:~ R$ cat /Users/R/NGS_data_process/VHH_HST_R1_R4/AM07C_PG1293_04A27_H1_L001_R2.fastq
```



特許（成立済み）

Method for determining and system
for determining polypeptide bonding
to target molecule

PCT/JP2014/080853

US 15/038,457

EP20140864675

Status : Patented (JP)
Submitted (PCT)
Applicant : MOLCURE



Method of screening for low
molecular weight antibody and
production method

P2013-247023

Status : Patented
Applicant : MOLCURE
Kagoshima univ.
Kyoto univ.
Ark resource
AIST



顧客

大学・研究機関
数多くのトップラボと共同研究



大手製薬企業
バイオテクノロジー企業
アメリカ・日本企業との実績

US Top 3
big
pharma

U.S.
small
biotech

Japanes
e
big
pharmas

Japanes
e
small
biotech

コアメンバー

小川 隆(博士)
CEO, Co-founder



慶應出身
AI・生命システム
分野横断の技術統合

玉木 聡志
CSO



慶應出身
AI・生命システム
バイオテクノロジー

伊原 頌二
CCO



東大出身
AI・数学・アルゴリズム

興野悠太郎
CTO, Co-founder



慶應出身
ロボティクス
バイオテクノロジー

アドバイザーボード（科学）



Kohei Tsumoto,
Prof.
Professor at The
University of Tokyo
*Expert of protein
engineering*



Masaru Tomita,
Prof.
Professor at Keio
University
*Expert of
systems biology*



Akio Kanai, Prof.
Professor at Keio
University
Expert of RNA



Yuji Ito, Prof.
Professor at
Kagoshima Univ.
*Expert of phage
display
screening*



Taizo Omura, Ph.D.
Former CTO at
Mitsubishi Materials
*Expert of
chemistry*



Takeshi Fukuhara,
Assoc. Prof.
Associate professor at
Juntendo Univ.
*Expert of hybridoma
screening*

AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



BenevolentAI

two^oAR



compugen

etc.

AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



Exscientia
DRIVEN BY KNOWLEDGE



AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



BenevolentAI

two³AR



compugen

etc.

AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



MODULUS

Exscientia
DRIVEN BY KNOWLEDGE

CYCLICA

AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



BenevolentAI

two^oAR



compugen

etc.

AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



Exscientia
DRIVEN BY KNOWLEDGE



AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



BenevolentAI

two^oAR



compugen

etc.

AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



Exscientia
DRIVEN BY KNOWLEDGE



AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



BenevolentAI

two³AR



compugen

etc.

AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



Exscientia
DRIVEN BY KNOWLEDGE



AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



BenevolentAI

two³AR



compugen

etc.

AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



Exscientia
DRIVEN BY KNOWLEDGE



特許取得済

ライフサイエンス領域向けに開発した新規人工知能エンジン

特許番号:特許第**6346367**号
登録日:**2018/06/01**

concept Encoder

テキスト情報のベクトル化・数値化

検査・バイタル情報等との共解析



医学論文



電子カルテ



診療記録



オミックス情報



バイタル情報



臨床検査値

AI医療ビジネス支援 および AI医療ソフトウェアの開発

診断支援 AIプログラム



発症予防 AIプログラム



医療情報分析 AI



創薬支援 AI



【診断】 認知症診断支援AIプログラム



2019年 AMED研究終了
 2020年 AI認知症診断 特許取得
 2021年 世界初となるAIMD臨床試験入り
 2023年 世界初の言語系AI医療機器承認へ！

共同研究・開発

慶応義塾大学病院



2020年 特許取得

【予測/予防】 転倒転落予測AIプログラム



転倒・転落予測システム

2020年 転倒予防学会 推奨

共同研究・開発

NTT東日本関東病院
藤田医科大学



2020年 特許取得

【医療DX】 内閣府 AIホスピタルPJ 技術協力



戦略的イノベーション創造プログラム
Strategic Innovation Creation Program

内閣府「戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)」の「AI (人工知能) ホスピタルによる高度診断・治療システム」プロジェクトへ参加



【創薬】 AI創薬支援 Drug Discovery



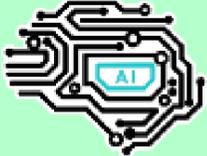
導入企業

武田薬品工業 (株)
中外製薬 (株) 他

特許申請中

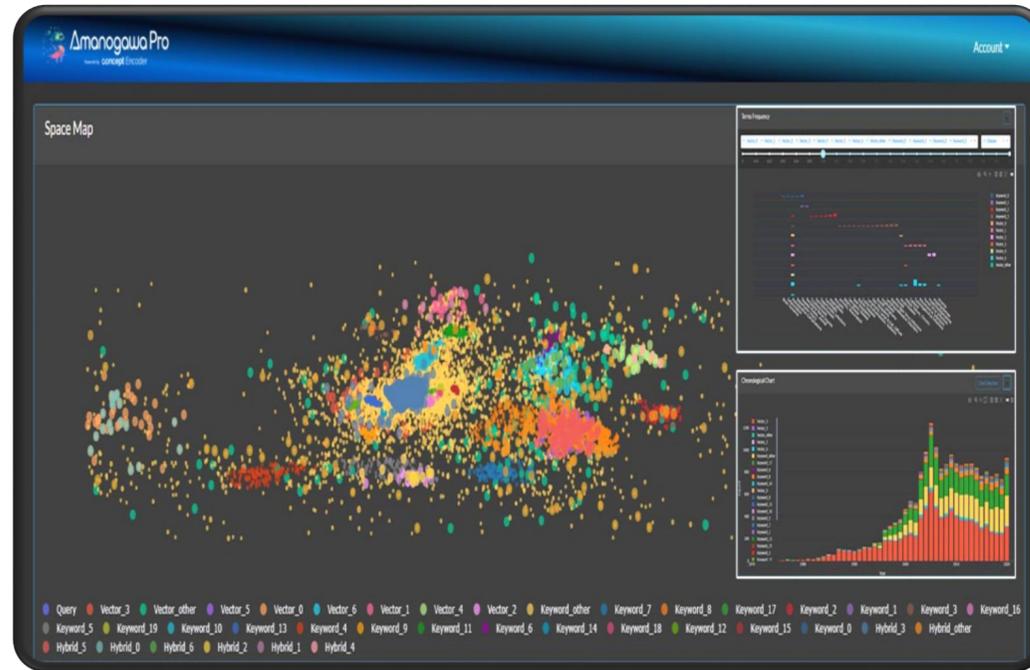


人工知能 技術



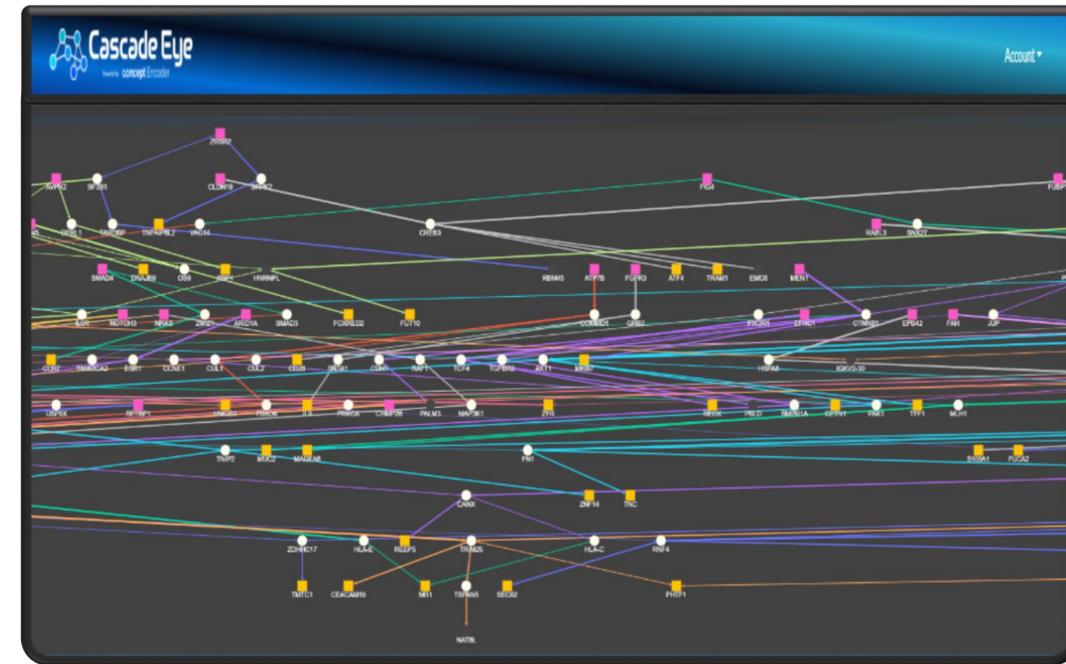
AIエンジン (Concept Encoder)

2018年 特許取得 登録番号: 特許第6346367号 登録日: 2018/06/01



膨大な論文情報を一瞬に探索

Keyword検索では見つからない情報の発見
網羅性を持った情報の全体像の把握



複雑な遺伝子・分子間の関連性を可視化

論文検索では気が付きにくい
新たな作用メカニズムや適応症の発見

AI創薬業界におけるポジショニング

AI標的探索

近似式による高速・高精度・少数データ駆動のAI（特許）
AI医療機器/法律等の領域でも実用化済み



AI分子設計

中分子・高分子の設計が可能なAI（特許）
人間を上回る精度で実用化済み



低分子の設計



AIドリブンのパイプライン創出により、革新的な医薬品創出が可能に

FRONTEO様

AIによる創薬標的探索

MOLCURE

AIによる医薬品分子設計

- FRONTEO様にて、AIを用いた新規の標的を探索を行う。
- MOLCUREにて、AIを用いた新規の医薬品分子設計を行う。
- 標的探索から分子設計までを、AIドリブンの手法で一貫して行い、革新的な医薬品創出が可能に。
- 製薬企業様に対して、本技術をパッケージとして提供していく予定。

ACCELERATE
DRUG DISCOVERY
for all incurable diseases



MOLCURE

contact@molcure.io

ACCELERATE
DRUG DISCOVERY
for all incurable diseases



MOLCURE

contact@molcure.io