

## 2 創薬研究領域のデジタル変革

# 創薬研究の高速化・高精度化を実現し、 変革をささえるデジタルプラットフォーム

創薬研究のデジタル化は、単に創薬研究の効率性を向上させるだけではなく、研究員がアイデア創出や仮説構築といった高度な知的活動により一層注力することを可能にする。NTT データは、創薬研究サイクルの超高速化が実現された世界という、デジタル化によってもたらされる創薬研究プロセスの未来像に向け、様々な取り組みを進めている。

### デジタルが実現する 創薬研究サイクルの超高速化

製薬企業の創薬環境は、モダリティの多様化や創薬ターゲットの複雑化などを受け厳しさを増している。一方において、創薬研究には人手による実験作業や属人的な作業記録など、デジタル化が進んでいない業務が多く残っている面もあり、多様なプレーヤーによる取り組みが進められている。

NTT データは、創薬研究プロセスの未来像を、創薬研究サイクルの超高速化が実現された世界と捉えており、実験設備の自動化・遠隔化と、現実世界のあらゆる営みをデジタル空間上に記録・蓄積するデジタルツイン化がその要になると考えている。

実験設備の自動化・遠隔化が実現すれば、実験設備の休まない稼働が可能となり、世界規模で実験設備リソースを共有できることで、創薬研究サイクルは飛躍的に加速する。また、研究員が膨大な実験作業から解放され、高度な知的活動へ注力できるように

もなる。

デジタルツイン化は、実験データ、研究員の思考や行動、臨床研究データなど、創薬研究プロセス上のあらゆるデータを集約し可視化する。多様なデータが蓄積されることで、高精度なAIシミュレーションや仮説構築が可能となるうえ、創薬における全プロセスを包括した定量的な振り返り・改善が実現する。その結果として、創薬研究サイクルは高速かつ自律的に、計画、実行、改善を繰り返し成長していくこととなる。

### デジタルが実現するための 4つのポイント

創薬研究プロセスにおける現状の

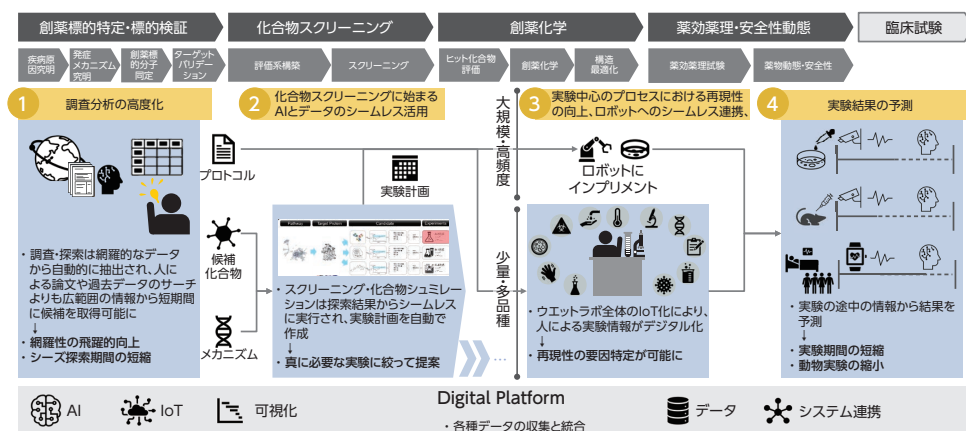


株式会社 NTT データ  
第二インタストリ統括事業本部  
製薬・化学事業部  
課長 横田 俊 氏

課題を踏まえた上で、デジタル化を実現していくには、4つのポイントがあると考えている。

#### <調査分析の高度化>

調査分析においては、これまでは人が論文サイトや社内文書などの様々なリソースをひとつずつ検索



し、必要な情報を探索してきているが、膨大な時間を要するにも関わらず、望む情報が得られないことも少なくはない。

高度な調査分析システムを導入し、人では読解しきれない広範囲の情報を自動的に探索・抽出して、そこから得られた示唆や仮説を提示することができるようになれば、研究員の負担は大幅に軽減する。また、自然言語処理AIを活用し、抽出した情報を自動で構造化・図表化することで、人が真に必要とする示唆・仮説が提示され、人間の判断の質・速度が飛躍的に向上することが期待される。

#### <実験計画作成までの

##### シームレスな実現>

実験計画は、創薬化学、薬効・薬理、安全性動態など様々なプロセスの中で何度も立てられる。合成中の化合物や合成完了時期、それに対する評価手法などをプロセス・部署間でまたがって連携する必要があり、多くの部署間で高頻度の連絡が求められる、連絡ミスが生じることも少なくはない。

この部署間の連携・連絡を自動化することで、スクリーニングから評価系構築、実験計画作成までのスムーズな進行を実現する。

プロセス全体の効率化、最適化が図れるだけでなく、統合された蓄積データの活用や、プロセスを横断したフィードバックのループが実現し、創薬研究プロセス全体の自律的かつ継続的な改善サイクルの実現につながる。

#### <再現性向上・効率向上>

従来の創薬研究における実験では、作業や記録が人の手によって行われていることも多く、記録ミスや記載忘れが生じたり、環境要素が結果に影響したりすることで実験結果に属人性が生じることとなっていた。

これを、カメラやセンサーを用いて、研究員の実験作業と環境要素をデジタル上に記録することで、作業記録におけるモレやミスを減少させ、実験の成功・失敗要因を詳細に分析することが可能となる。

さらに、実験作業にロボットを活用することで、実験作業のオートメーション化と自律的な実験プロセスの最適化による安定した実験結果の再現が可能となる。

#### <実験結果予測による効率向上>

実験は、最後まで実行しないとその成功・失敗がわからないため、トライ&エラーを繰り返し膨大な時間、コスト、資材を消費する。

実験手順と実験中の研究員の動作やラボの環境データ、試薬の様子などの実験データを蓄積し、成功/失敗のパターンをAIに学習させ、このAIに実験中にモニタリングした実験情報を入力することで、その実

験の成功確率の予測が可能となる。

その予測を基に、実験の継続・中止の判断を迅速に行うことで、効率的な実験を行ってリソースを節約すると共に、より高精度で高速な実験サイクルが実現する。

## 変革のカギを握る デジタルプラットフォーム

これらの変革ポイントの実現には、様々なデータがデジタル上に蓄積され、利活用可能な形となっていることが必要となる。そのためには、社内外のデータを一元的に集約し、各プロセスのソフトウェア・AIを統合管理する、プロセス横断的なデジタルプラットフォームの整備が不可欠だ。

創薬研究プロセスの中で創出されたあらゆるアウトプットをインプットとして活用するという繰り返しにより、デジタルプラットフォームを中心とする自律的な改善サイクルが形成され、創薬研究プロセス全体が継続的に高速化・高精度化し、未来の超高速創薬研究サイクルの実現につながっていくと考えている。

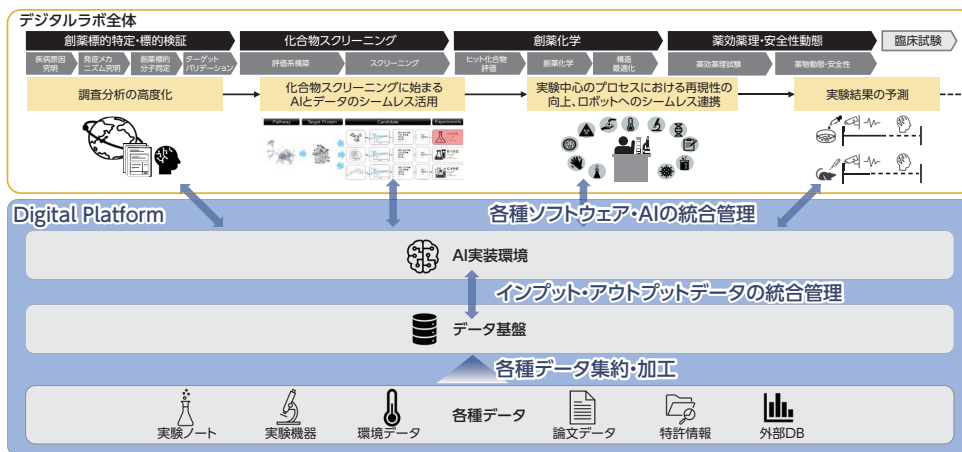


図2 デジタルプラットフォームの全体像