

索引

数字

- 2 dimensional electrophoresis-
CETSA (2DE-CETSA) 17
2型糖尿病 159, 174
3層モデル 214
28日間反復投与毒性試験 213

和文

- あ**
圧縮木インデックス 85
アフィニティ精製法 41
アンメットメディカルニーズ
..... 62, 67
- い**
遺伝子摂動 62
遺伝子発現プロファイル 90
医薬品開発 181
医薬品有害事象報告システム 69, 187
インシリコ手法 196
インビトロ試験 196
- え**
液-液抽出法 36
液体クロマトグラフィー連結タンデム
質量分析 24
エンコーダ 130
- お**
オープンリーディングフレーム 137
オフターゲット 189
オフライン最適化 230
オンライン最適化 230
- か**
ガイダンスドキュメント 197
ガウス過程回帰 230
拡散モデル 78, 227
獲得関数 230
化合物潜在空間 95
化審法 200, 213
活性化標的分子 64, 65
肝がん 38
還元型 Coenzyme Q 160
感受性遺伝子 61
関数最適化 115
乾癬 (psoriasis) 69

- き**
キーイベント 214
機械学習 61, 129, 184, 229
希少疾患 60, 67, 93
基盤モデル 203
逆合成モデル 109
逆相関法 64
キュレーション 194
強化学習 (RL) 115
教師あり学習 65
教師なし学習 65
共通基盤 205
共変動ネットワーク解析 43
- く**
空間トランスクリプトーム技術
..... 153, 155
クオリティコントロール (QC) 38
クラスタリング解析 186
グラフニューラルネットワーク
..... 89, 90, 116, 192
- け**
計算基盤 205
結合親和性 183
結合親和性スコアプロファイル 184
欠損値 177
ゲノム 61
ゲノムワイド関連解析 61
ゲフィチニブ 105
ケミカルスペース 122
ケミカルプロテオミクス 18
研究プロセスの自動化 94
健康状態 170
言語モデル 146
- こ**
抗がん剤 87
抗菌ペプチド 148
構造活性相関モデル 110, 111, 135
構造生成 AI 129, 130, 208
構造生成モデル 108
抗体医薬品 229
交絡因子 90
個別分子解析 53
- せ**
再帰型ニューラルネットワーク
..... 103, 115, 130
再現精度 198

- 最適化 177
最適化フレームワーク 136
細胞外小胞 40
細胞軌道解析 179
細胞サーマルシフトアッセイ 16
細胞老化 55
サブライズ指標 58
作用機序仮説 92
作用メカニズム 179
サロゲートモデル 136

- し**
シークエンススペース空間トランス
クリプトーム 156
ジェネレータ 131
時間相関型 PLOM-CON 法 43
資金調達ラウンド 235
システム生物学 170
システム標的 169
次世代創薬 AI 開発事業 207
疾患統合データベース 212
実験自動化 205, 226
質量分析イメージング法 39
自由エネルギー摂動法 77, 223
主要組織適合遺伝子複合体 141
条件付き Transformer 119
除タンパク法 36
進化的アルゴリズム 148
シングルセル型 PLOM-CON 法 43
シングルセルトランスクリプトーム
..... 154
シングルセルトランスクリプトーム
技術 153
深層学習 (DL) 191
深層生成モデル 129
シンボリック-ニューラル
ハイブリッドシステム 86

- す**
数理的最適化 138
数理的探索 136
スキヤフォールド・ホッピング 118
スタートアップ 235
スパース推定 44
スパースモデリング 187

- せ**
生成 AI 95, 96
正則化回帰モデル 191
精密医療 181

生理学的薬物動態 (PBPK) シミュ レータ …………… 216	毒性試験データベース…………… 196	プローブベース空間トランス クリプトーム …………… 155
説明可能な AI …………… 193	特徴ベクトル…………… 230	プロテオーム…………… 17
潜在空間探索…………… 115	特発性肺線維症…………… 210	プロテオーム熱安定性評価法…………… 30
全タンパク質構造…………… 183	ドッキングシミュレーション …………… 130, 184, 185	プロテオミクス…………… 32
先端モデル動物支援プラットフォーム の分子プロファイリング支援活動 (AdAMS) …………… 21	ドッキングスクリーニング…………… 99	プロファイル予測 AI …………… 208
そ	ドパミンD2受容体…………… 69	分子シミュレーション…………… 227
相関異常度…………… 47	ドラッグリパーバシング…………… 88, 89	分子生成モデル…………… 96
相互作用エネルギーベクトル (IEV) …………… 118	ドラッグリポジショニング…………… 61	分子ネットワーク…………… 169
創業支援 AI …………… 208	トランスオミクス…………… 159, 162	分子標的薬…………… 170
創業標的探索…………… 212	トランスクリプトーム… 17, 61, 129	へ
創業標的タンパク質…………… 129	トランスクリプトームに基づく構造 生成 AI …………… 131	平均二乗偏差…………… 79
創業標的分子…………… 60, 61 , 63	トランスクリプトームワイド 関連解析 …………… 62	併行条件…………… 198, 199
阻害標的分子…………… 62, 65	な	併行精度…………… 198
た	内閣府食品安全委員会…………… 200	ベイズ最適化 …………… 54, 105, 135, 136, 230
ターゲットリポジショニング…………… 61	ナレッジグラフ…………… 222	ベイズ融合法…………… 65
大規模言語モデル (LLM) 90, 203	難治性疾患…………… 66	ベンチャーキャピタル (VC) …… 233
多重免疫蛍光染色法…………… 49	に	ベンチャー投資家…………… 233
多層解析オーケストレーション… 91	日本人多層オミックス参照パネル 38	変分オートエンコーダ…………… 97, 130
タンパク質言語モデル …………… 138, 146, 222	ニューラルネットワーク…………… 130	ほ
ち	ね・の	報告オッズ比…………… 70
逐次の分子選択問題…………… 53	ネオアンチゲン…………… 141	ポートフォリオマネージャ…………… 54
逐次分子選定システム…………… 53	ネットワーク医学・薬理学…………… 170	ポリファーマコロジー…………… 189
知識グラフ…………… 90	能動学習…………… 136, 138	ま
て	は	マーカー探索…………… 34
ディスクリミネータ…………… 131	パーキンソン病…………… 70	マイクロスケール熱泳動 (MST) 20
低分子化合物…………… 225, 234	バーチャルスクリーニング… 76, 130	マシユ効果…………… 52
データ駆動型アプローチ…………… 114	バイオ医薬品…………… 227	マテリアルズ・インフォマティクス (MI) …………… 114
データ駆動型最適化…………… 135	バイオインフォマティクス…………… 88	マルチオミクス…………… 169
データ駆動型創薬…………… 217	バイオレイヤー干渉法…………… 231	マルチタスク学習…………… 142, 192
敵対的生成ネットワーク…………… 130	肺がん…………… 210	マルチモーダル基盤モデル…………… 203
デコーダ…………… 130	ハイスループットスクリーニング …………… 76, 114	め・も
テストガイドライン…………… 197	パスウェイ…………… 179	メタボローム…………… 34, 163
転移学習…………… 192	発現プロテオーム…………… 163	メタボロミクス…………… 32, 34
テンソル…………… 177	パレート最適化…………… 120	メトホルミン…………… 159
テンソル分解…………… 177	パレートフロント…………… 120	メンデルランダム化解析…………… 61
天然物…………… 95	反復投与毒性試験…………… 200	モンテカルロ木探索…………… 103, 115
と	ひ	や
統計的測定精度評価…………… 196	非遺伝毒性発がん性…………… 200	薬剤ターゲット同定…………… 23
統合木表現…………… 84	ビッグデータ…………… 66, 181	薬剤耐性菌…………… 148
動的ネットワークバイオマーカー (DNB) 理論…………… 49	評価関数最適化…………… 115	薬物-タンパク質-疾患ネットワーク 情報…………… 185
導電性粘着フィルム…………… 40	表現型スクリーニング…………… 16, 167	薬物-タンパク質-副作用ネットワーク …………… 188
動物実験代替法…………… 196	病的挙動…………… 230	薬物-タンパク質相互作用…………… 183
東北メディカル・メガバンク (TMM) プロジェクト…………… 38	標的タンパク質分解誘導剤…………… 226	薬物応答遺伝子発現データ…………… 176
ドーパミン受容体D2…………… 117	標的分子…………… 16	薬物動態…………… 190
毒性学的懸念の閾値 (TTC) …… 198	ふ	薬理作用…………… 184
	不均衡分析…………… 90	
	フラグメント探索…………… 117	

ら・り・れ

ライフ インテリジェンス コンソーシ アム	207
リアルワールドデータ	89
リードアクロス	196, 198
リード化合物	123
リード抗体最適化	229
理化学研究所天然化合物バンク (NPDepo)	20
リカレントニューラルネットワーク	103, 115, 130
立体構造情報	183
理論生物学	174
リン酸化プロテオーム	163
連合学習	208, 226

欧 文

A

ABC シークエンシング	156
Active learning	54, 136, 138
AdAMS	21
ADME	190
AGIS	204
AI for Science	203
AI-SHIPS Chemical Toxicity Data- base	215
AI-SHIPS プロジェクト	213
AI エージェント	93, 94
AI 関連新興企業	234
AI 駆動型創薬研究	87
AI 駆動群探索システム	53
AI 抗体創薬	150
AI 創薬	108, 217, 221, 225
AI 誘導クエリ拡張	86
AlphaFold	32, 183, 203, 234
AMP-Atlas	148, 149
AMP/ATP 比	160
AMPK	160
AMPK リン酸化	162
AMPs	148
Anc2vec	56
antimicrobial peptides	148
AOP	200, 201
ARCH (AbbVie R&D Convergence Hub)	238
Arivale コホート	172
atom-wise search (原子探索)	117

B

Bayesian optimization	54, 105, 135, 136, 230
Bi-LSTM (Bidirectional Long Short-Term Memory)	143

Biological BMI	172
BMI	171

C

cascade variational autoencoder (casVAE)	110
CBP	160
CellAge	55
CETSA (cellular thermal shift assay)	23, 166
ChEMBL	82
Chemical VAE	130
ChemProteoBase	18
ChemTS	102, 209
Chromium	154
common diseases	67
Complex- I	160
Complex- IV	160
conditional Transformer	119
convolutional neural network (CNN)	123
COVID-19	91
CREB binding protein	160
CROP-seq	155
Cyclic IF 法	49

D

D4	217
DAIA	207
DAIA 創薬 AI プラットフォーム	207
data-centric AI	194
de novo 設計	236
Deep Learning	142
Δ BMI	172
Δ 健康理論	173
digital twin	174
direct in sample sequencing (DISS)	158
disproportionality analysis (DPA)	90
DL co-folding 法	76
DL docking 法	76
DMTA サイクル	223
DRD2	69, 117
drug affinity responsive target stability (DARTS)	18
drug tolerant persister 細胞	154
Dscore	105
DTPs	154
DyRAMO	105, 209

E

EGFR	98, 105
eQTL (expression quantitative trait locus)	61
Eroom の法則	52
Evercode	154

EVs	40
experimentally well-accessible genes	52
Extended-Connectivity Fingerprint (ECFP)	97

F

FAERS (FDA adverse event reporting system)	69, 187
FBPase	164
FCD (Fréchet chemnet distance)	100
federated learning	208
Feedback Vertex Set (FVS)	56
FEP	77, 223
fingerprint	187
Food As/Is Medicine (FAM/FIM)	169
foundation model	203
fragment-wise search	117
FRATTVAE (fragment tree- transformer VAE)	100

G

GAN	131
Gargoyles	116
GATE	88, 91
Gene Ontology (GO)	56
generative adversarial network	130
generative topographic mapping	124
GNN (graph neural network)	89, 90, 116, 192
GP2 (glycerol 3-phosphate dehydrogenase 2)	160
GPT-4	85
GPU 大規模ドッキング	222
graph attention autoencoder	88
GWAS	61, 62, 63
GWAS 要約データ	62

H

HESS	200, 214
high-throughput-screening (HTS)	76, 114
Hit Design	219
Hit-to-Lead	114

I

IEV2Mol	118
IG (integrated gradients)	194
ISO 5725	198
ISO/TC 69	198
ISO/TR 27877	199
Isomorphic Labs	234

J · K

JFCR_LinCAGE 20
 jMorp 38
 JSONL データ 82
 jXBW (JSONL eXtended Burrows-Wheeler Transform) 83
 KEGG chemical function and sub-structure (KCF-S) 記述子 70
 kMol 208
 knowledge graph 90

L

LC-MS 37
 LC/MS/MS 24, 28
 ligand-based virtual screening (LBVS) 77
 Lila Sciences 234, 236
 Lilly TuneLab 238
 LINC 207
 LiP 29
 LiP-MS (limited proteolysis-MS) 27
 LiP-Quant 30
 Log Fold Change 56

M

Materials Innovation Infrastructure 121
 MCP (model context protocol) 94
 MCTS 103, 115
 MELLODDY プロジェクト 207
 Meltome atlas 26
 Mendelian randomization 61
 MERMAID 115
 MetaboAnalyst 37
 MetBMI 172
 MHC 141
 MIE 214
 Milton 238
 model-centric AI 194
 molecular topographic map 122
 Mothra 120
 mRNA ワクチン 135
 MS 37
 MSI 39
 MTM インバーター 126
 Multi-task Learning 142, 192

N · O

NADH/NAD⁺ 比 160
 Neoantigen 141
 NOEL 215
 NP-VAE (natural product-oriented variational autoencoder) 96
 NVIDIA cuDF ライブラリ 82

OECD 197
 ORF 137

P

pAMPK 162
 pandas 82
 Parkinson's disease 70
 PBAS (proteome-wide binding affinity score) プロファイル 185
 PEFT (parameter-efficient fine-tuning) 147
 penalized logP 110
 PIP-seq (particle-templated instant partitions sequencing) 154
 PLOM-CON (Protein Localization and Modification-based Covariation Network) 解析法 43
 PRISM 210
 PROTAC 104, 226
 PROTAC-TS 104
 Protein Data Bank (PDB) 78
 protein language model 138, 146, 222
 PubChem 82

Q

QED (quantitative estimation of drug-likeness) 97, 110
 QSAR モデル 110, 111, 135
 QuantumScale 154

R

RAG (retrieval-augmented generation) 93
 REACH 200
 REINVENT 130, 209
 RePhaIND[®] 89
 Retrieval and Structuring (RAS) 83
 Retrieval-Augmented Generation (RAG) 83
 retrosynthetic accessibility (RA) スコア 109
 RMSD 79
 RNN (recurrent neural network) 103, 115, 130
 root mean square deviation 79
 ROR (reporting odds ratio) 70

S

SAR 218
 sci-Plex-GxE 155
 sci-RNA-seq 154
 Scientific Superintelligence 236
 scRNA-seq 154

Seeker 156
 SHAP (SHapley Additive exPlanations) 193
 SIDER 187
 SMILES (simplified molecular input line entry system) 96, 103, 115, 123, 130, 217
 SPLiT-seq 154
 stability of proteins from rates of oxidation (SPROX) 18
 StructRAG 83
 structure-based virtual screening (SBVS) 77
 surrogate model 136
 synthetic accessibility (SA) スコア 109

T

TabPFN 104, 105
 TELR (target estimation with logistic regression プロファイル) 187
 temperature sampling 127
 tensor-train 分解 177
 TESS (target estimation with similarity search プロファイル) 187
 Teton CytoProfiling system 157
 thermal proteome profiling (TPP) 22
 thermofluor assay 23
 Tokyo-1 221
 TPE 231
 TRACER 119
 Transformer 100
 Trekker 156
 TRESOR 62, 64
 TRIOMPHE-BOA 131
 TRIP (Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms) 204
 TSA (thermal shift assay) 23
 TWAS 62

V

VAE 97, 130
 venture capital 233
 virtual cell (仮想細胞) 236
 Visium HD 156

W · X · Y

Wollenberger clamp 162
 XAI 193
 Xaira Therapeutics 234, 236
 X 線結晶構造解析 32
 Yessotoxin 98