



FRONTEO ~COMBAT COVID-19~ ① AIを活用した候補薬探索の概要

FRONTEO AI
Kibi+ & **concept Encoder**

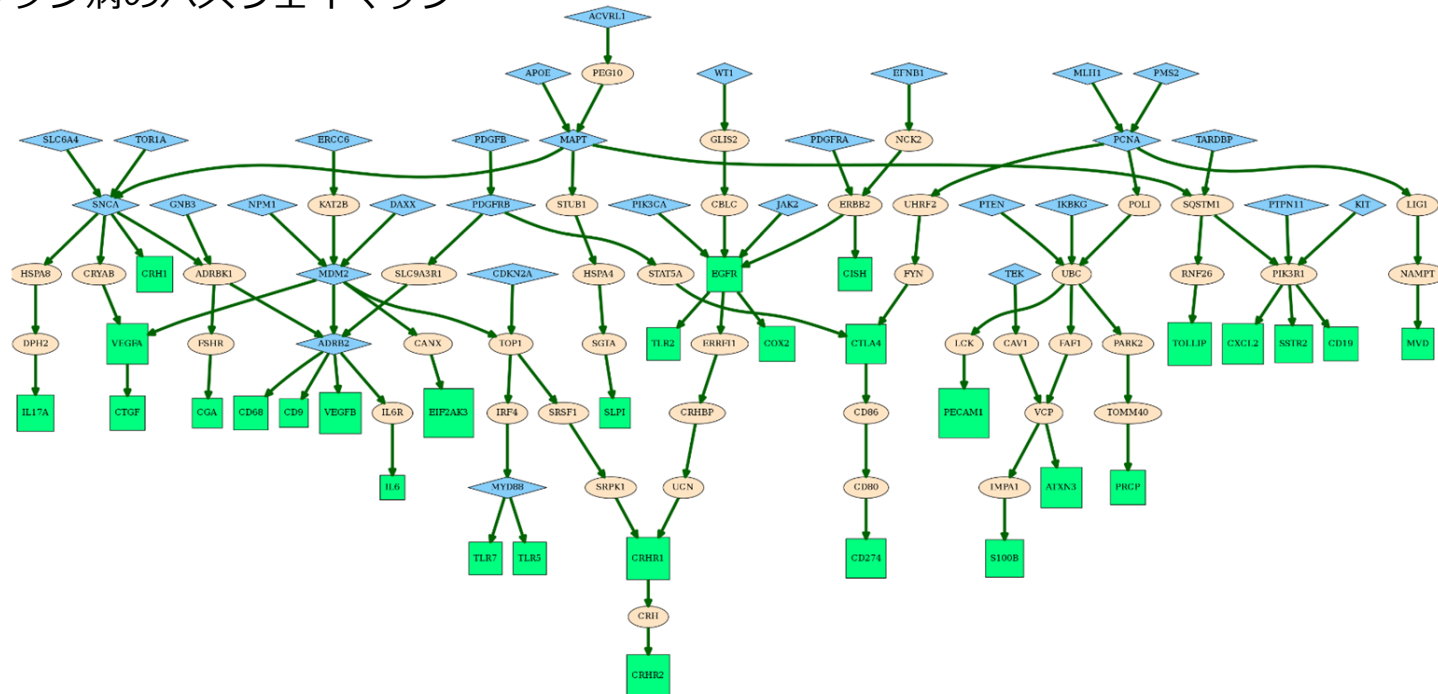
MAY. 2020



膨大な論文データを読み込み、その中から特定の疾患について、疾患によって変異する人間の遺伝子情報をAIが解析し、関係性を経路図に表現。

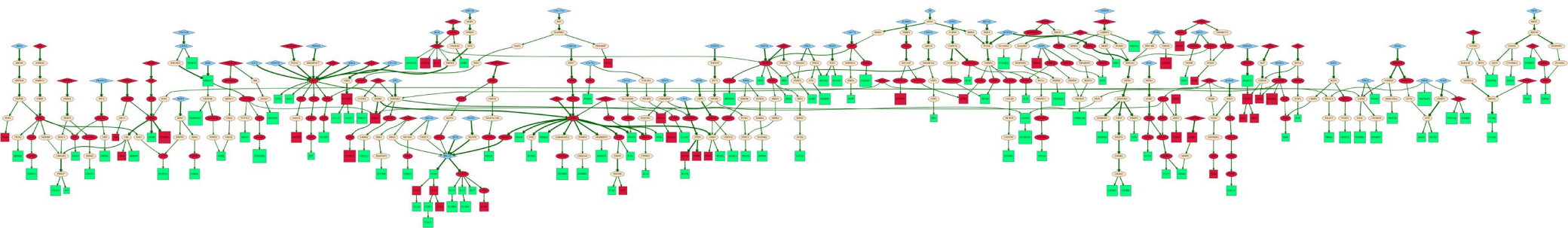
Cascade-Eye

例) パーキンソン病のパスウェイマップ



◆ : genes predicted as the causality of the disease

■ : genes predicted as the responsiveness of the disease



赤色は、既存の薬もしくはは化合物のターゲットになっている分子

NAME	Phase	50	101	151	201	250	301	351	401
1 AT7519	2	Edotecarin	Mestranol	Somatropin recombinant	ardeparin	dasatinib	golimumab	nitroliotic acid	rosuvastatin
2 AV411	2	Elsamituoin	Methacycline	Sucralfate	arfomerol	daunorubicin	halothane	halothane	salicylic acid
3 AZD 3355	4	Enoxaparin	Methionine Sulfoxide	Sulfamerazine	arsenic trioxide	decanoic acid	heparin	norgestimate	salmeterol
4 Acenocoumarol	4	Epinephrine	Methyl Nonanoate (Ester)	Sulfamethizole	atenolol	dehydroepiandrosterone	ibuprofen	ocripilamin	sargramostim
5 Actintrin	4	Estriol	Metolazone	Sulodexide		deoxycholic acid	icatibant	olanzapine	sevoflurane
6 Adenosine Triphosphate	4	Etanercept	Mibefradil	TG100801		desflurane	imatinib	oleic acid	simvastatin
7 Afelimomab	0	Ethacrynic acid	Mimosine	Tacrolimus		desopressin	imiquimod	olopatidine	sorafenib
8 Aleflizazar	3	Ethinyl Estradiol	Motuporin	Tenecteplase		desmethasone	indacaterol	omega interferon	sotalol
9 Allylestrenol	4	Etonogestrel	Muronomab	Thiothixene		dexamethasone	infiximab	orciprenaline	spironolactone
10 Alprenolol	0	FARNESYL	NCX 950	Tiludronate		dexamethasone	ingenol mebutate	ospremine	staurosporine
11 Alteplase	4	Favld	Nadroparin	Tocainide		diazepam	insulin detemir	oxcarbazepine	stearic acid
12 Amrione	4	Finoterol	Natural alpha interferon	Toremifene		diazepam	ipilimumab	oxtriphylline	sulfamethoxazole
13 Antihemophilic Factor	4	Filgrastim	Nicardipine	Triamterene		diclofenac	irbesartan	paclitaxel	sulfasalazine
14 Antibody to IgG	4	Flavopiridol	Nisoldipine	Tris (Hydroxymethyl)		diclofenac	irimeotecan	palivizumab	sulfindac
15 Aprindine	0	Flunarizine	Nitrendipine	Urokinase		difenhydramine	isoflurane	palmitic acid	sunitinib
16 Asenapine	4	Fluorescein	Norepinephrine	Vatalanib		dobutamine	isoprenaline	parecoxib	tamoxifen
17 Auranofin	4	Fluorouracil	Nethindrone	Vemurafenib		doxetamine	ivacaftor	pazopanib	tamoxifen
18 BNP 1350	2	GV1001		Vinblastine		dronedarone	ketazolam	pegademase bovine	taurocholic acid
19 Bepridil	4	Gadobutrol		Vorinostat		dronedarone	ketazolam	pegademase bovine	telaprevir
20 Bethanidine	4	GS-207		170.XL019		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
21 Botulinum Toxin Type B	4	GS-207		171.XL184		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
22 Bufuralol	0	GS-207		172.XL281		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
23 Bupranolol	0	GS-207		173.XL647		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
24 CHF 4227	4	GS-207		174.XL765		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
25 Calcium	4	GS-207		175.XL820		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
26 Carboxymycobactin T	4	GS-207		176.XL844		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
27 Cefmetazole	4	GS-207		177.XL999		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
28 Cefonicid	4	GS-207		178.XOMA 052		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
29 Cefoperazone	4	GS-207		179.abatacept		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
30 Cinnarizine	4	GS-207		180.abiraterone		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
31 Clenbuterol	4	GS-207		181.acebutolol		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
32 Clofazimine	4	GS-207		182.acepromazine		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
33 Clomifene	4	GS-207		183.acetylcysteine		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
34 Coagulation Factor IX	4	GS-207		184.acetylsalicylic acid		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
35 Compound 18	4	GS-207		185.adalimumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
36 Compound 19	0	GS-207		186.afatinib		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
37 Compound 9	4	GS-207		187.alfimoxifene		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
38 Conjugated Estrogens	4	GS-207		188.alfibercept		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
39 Crofelerem	4	GS-207		189.almogestrol		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
40 Cyclosporine	4	GS-207		190.alefacept		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
41 Cysteinylsulfonic Acid	4	GS-207		191.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
42 Dacizumab	4	GS-207		192.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
43 Dalteparin	4	GS-207		193.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
44 Desogestrel	4	GS-207		194.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
45 Dienestrol	4	GS-207		195.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
46 Digitoxin	4	GS-207		196.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
47 Docetaxel	4	GS-207		197.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
48 Double Oxidized Cysteine	4	GS-207		198.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline
49 ET389	4	GS-207		199.alemtuzumab		drotrecogin alfa	ketazolam	pegademase bovine	terbutaline

Tocilizumab

chloroquine

Nafamostat

既に候補薬となっている化合物にもたどり着いている

感染した場合にウイルスの増殖を防ぐ化合物



化合物名	市販薬名	分類
ヒドロキシクロロキン	プラニケル	皮膚エリテマトーデス、全身性エリテマトーデス治療薬

免疫機能へ働きかけ重症化を防ぐ化合物

化合物名	市販薬名	分類
イリノテカン	カンプト	抗がん剤
	トポテシン	抗がん剤
カルベジロール	アーチスト	降圧剤
ルカンソン		抗微生物薬
トシリズマブ	アクテムラ	関節リウマチ治療薬
バリシチニブ	オルミエント	関節リウマチ治療薬
ナファモスタット	フサン	抗凝固薬
ARB	ニューロタン等	降圧剤



AIによる探索 = 網羅的

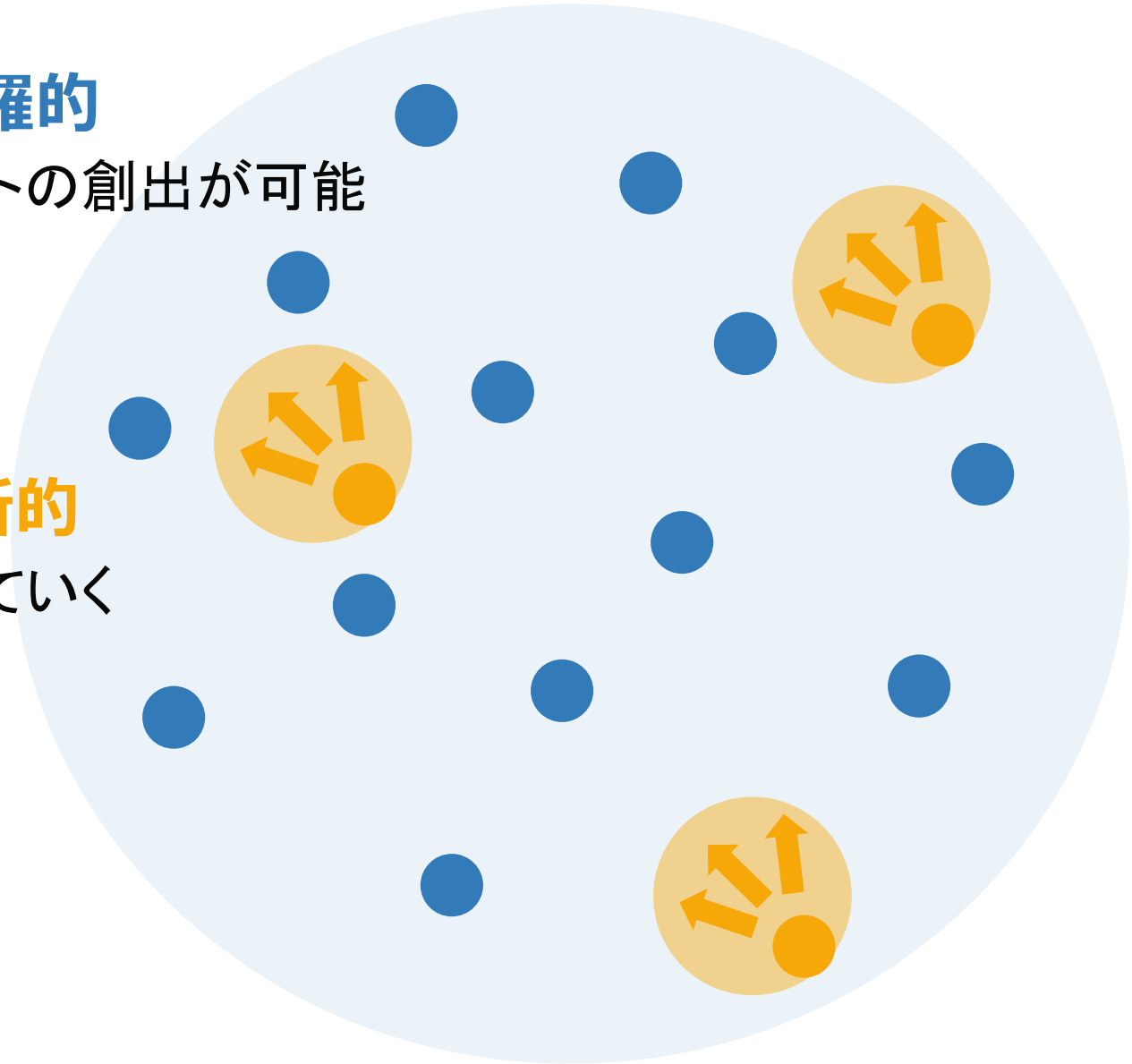
サステナブルなターゲットの創出が可能

-  AIによる探索範囲
-  AIが発見した候補薬

人による探索 = 局所的

研究者の仮説から広げていく

-  人による探索範囲
-  人が発見した候補薬



AIが創薬力向上に貢献

- ①人間の思い込みによるバイアスを排除した治療薬開発
- ②全体像の把握によるサステナブルな創薬ターゲットの創出
- ③創薬研究の大幅な効率化

FRONTEO

～COMBAT COVID-19～

②FRONTEOのAIによる候補薬探索手法について

注意

本資料に記載している、候補薬や根拠等はいくまでも論文等の情報探索の結果によるもので、候補薬の効果及び副作用を保証するものではありません。

本資料に記載の候補薬・化合物を臨床で使用する場合には、専門家のレビューおよび治験等の十分な精査・手続が必要です。



この資料は下記により作成されました。

株式会社FRONTEO

108-0075 東京都港区港南2-12-23 明産高浜ビル

TEL : 03-5463-6375

FAX : 03-6825-3881

東証マザーズ上場