

FRONTEO、AIによる医薬品の毒性メカニズム予測について 日本毒性学会学術年会で発表

AI創薬支援サービス「Drug Discovery AI Factory」の活用事例を口演

株式会社FRONTEO（本社：東京都港区、代表取締役社長：守本 正宏、以下「FRONTEO」）は、2025年7月2日から4日にかけて開催された「第52回日本毒性学会学術年会」にて、武田薬品工業株式会社の研究チームと共同で、AI創薬支援サービス「Drug Discovery AI Factory（以下「DDAIF」）」を活用した医薬品毒性メカニズム予測の研究成果の口演発表を行いました。

本発表では「Investigative Toxicology*におけるAIの利用と課題」をテーマとして、DDAIFを用いて薬剤誘発性毒性に関与する論文未報告の分子（遺伝子）やメカニズムを予測した結果を、ウェット研究（細胞、動物などを用いた生物学的試験）による検証に活用する取り組みについて報告しました。こうした研究の進展は、安全性の高い医薬品の研究開発、また毒性リスクを早期に予測できることによる開発コストの削減や開発期間の削減に貢献します。

FRONTEOは今後も創薬研究者と協働し、DDAIFを活用した医薬品の安全性評価・解析を通じて創薬開発のスピードと成功確率を高め、医療の質および患者のQOL（生活の質）向上を支えてまいります。

* 調査的毒性学。医薬品研究開発において、毒性メカニズム解明や安全評価、副作用の軽減、安全性バイオマーカーの開発などを取り扱う領域。

■FRONTEO DDAIF について

URL:<https://lifescience.fronteo.com/products/drug-discovery-ai-factory/>

創薬の仮説生成



「FRONTEO Drug Discovery AI Factory (DDAIF)」は、自然言語処理に特化したAI「KIBIT (キビット)」(日米特許取得済)と、FRONTEOの創薬研究者およびAIエンジニアの知見を融合したAI創薬支援サービスです。疾患関連遺伝子ネットワークの解析や、標的候補に関する仮説の構築を通じ、医薬品開発における研究者の意思決定を強力にサポートします。

本サービスはすでに複数の大手製薬企業で導入されており、実績を積み重ねています。

【参考：製薬企業との共創プロジェクト】

- FRONTEO とマルホ、Drug Discovery AI Factory を活用した皮膚科領域における創薬標的探索に関する共創プロジェクトを開始,<https://www.fronteo.com/pr/20250710>
- 富士製薬工業とFRONTEO、女性医療領域における創薬シーズ評価に関する共創プロジェクトを開始,<https://www.fronteo.com/pr/20250709>
- メタジェンセラピューティクスとFRONTEO、世界的に注目されるマイクロバイオーム創薬の共同研究を開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250630>
- FRONTEO と中外製薬、Drug Discovery AI Factory を活用した標的探索に関する共創プロジェクトを開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250515>
- EA ファーマとFRONTEO、AI を活用した創薬の標的探索に関する共創プロジェクトを開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250512>
- FRONTEO とエーザイ、Drug Discovery AI Factory を活用した標的探索に関する共創プロジェクトを開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250128>
- FRONTEO と丸石製薬、Drug Discovery AI Factory を活用したバイオマーカー探索に関する共創プロジェクトを開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250109>
- FRONTEO とU B E、Drug Discovery AI Factory を活用したドラッグリポジショニングに関する共創プロジェクトを開始, <https://www.fronteo.com/pr/20241114>

【参考：アカデミアとの共同研究プロジェクト】

- FRONTEO と東京科学大学、「Drug Discovery AI Factory」を活用した新たな創薬標的の探索に関する共同研究を開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250513>
- FRONTEO と熊本大学、Drug Discovery AI Factory を活用した新たながん治療法探索に関する共同研究を開始, <https://www.fronteo.com/pr/20250508>

■株式会社 FRONTEO について URL: <https://www.fronteo.com/>

FRONTEO は、自社開発の特化型 AI「KIBIT (キビット)」の提供を通じて、日夜、社会課題と向き合う各分野の専門家の判断を支援し、イノベーションの起点を創造しています。当社独自の自然言語処理技術（日米欧特許取得）は、汎用型 AI とは異なり、教師データの量およびコンピューティングパワーに依存することなく、高速かつ高精度での解析を可能にします。加えて、解析した情報をマップ化（構造を可視化）する特許技術を活用することで、「KIBIT」が専門家のインサイトにダイレクトに働きかけることができ、近年、KIBIT の技術が創薬の仮説生成や標的探索にも生かされています。



KIBIT の独自技術およびアプローチを通じて、「記録に埋もれたリスクとチャンスを見逃さないソリューションを提供し、情報社会のフェアネスを実現する」理念の実現に向けて、[ライフサイエンス AI](#)、[リスクマネジメント（コンプライアンス支援分野、経済安全保障分野、リーガルテック AI 分野）](#)、DX（[プロフェッショナル支援分野](#)）の各事業で社会実装を推進しています。

2003 年 8 月創業、2007 年 6 月 26 日東証マザーズ（現：東証グロース）上場。日本、米国、韓国、台湾で事業を展開。第一種医療機器製造販売業許可取得、管理医療機器販売業届出。資本金資本金 899,176 千円（2025 年 3 月 31 日時点）。

※Drug Discovery AI Factoryに使われている技術は、FRONTEOが日本および韓国、米国、欧州で計21件の特許権を取得しています。

※FRONTEO、KIBIT、Drug Discovery AI FactoryはFRONTEOの日本および韓国、米国、欧州における商標または登録商標です。

<報道関係者のお問い合わせ先>

株式会社 FRONTEO 広報担当

Email: pr_contact@fronteo.com 電話 : 080-4321-6692

<ライフサイエンス AI 事業に関するお問い合わせ先>

株式会社 FRONTEO ライフサイエンス AI 事業本部

<https://lifescience.fronteo.com/contact>