

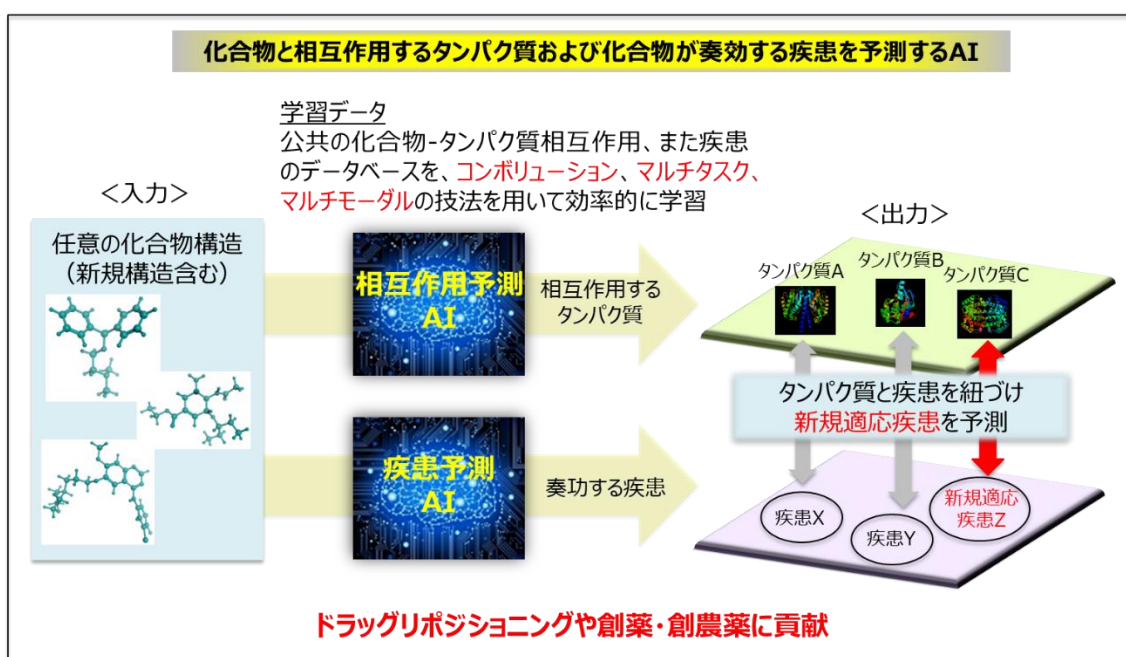
② ドラッグリポジショニング (LINC 内番号 : PJ10)

AI システムの概要

近年、画像データなどに応用される AI 技術である「コンボリユーション」を化合物に応用する研究が活発になってきている。コンボリユーションを用いて、我々は、様々なタンパク質に対する化合物の活性を学習・予測するシステムを構築した。

画像データと異なり、化合物の公共データベースは、データ量、質の点でいまだに充分ではない。そこでタンパク質と化合物の活性のパターンをマルチタスクやマルチモーダルという技法で効率的に学習させるアプローチをとり、学習に使われるデータを精査することで精度の高いシステムの構築を進めている。

このシステムを「ドラッグリポジショニング：既存のある疾患に有効な治療薬から、別の疾患に有効な薬効を見つけ出すこと」に応用するのが最終目標である。



AI システムの社会応用可能性

新規の低分子医薬品の開発にますます資金と時間が必要となっている。そこで、既存の医薬品を今まで適応されていなかった疾患治療に応用する「ドラッグリポジショニング」研究が進んでいる。既存医薬品の安全性は担保されており、治験を簡略化できるため、医薬品開発期間の短縮が可能となる。我々の AI モデルを使って、より精度良く、かつ効率的なドラッグリポジショニングを実現することで、従来の手法では発見できなかった新たな適応疾患の探索ならびに創薬・創農薬の研究開発期間の更なる短縮化と費用削減が期待される。

参画メンバー (企業、アカデミア)

ライフ系企業 13 社、(株)エクサウィザーズ

(国研) 医薬基盤・健康・栄養研究所、京都大学大学院 医学研究科