

AI/DXで拓くデータ駆動型創薬の未来



京都大学大学院医学研究科
ビッグデータ医科学分野 教授

理化学研究所 計算科学研究センター
HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム
部門 部門長

奥野 恭史 氏

我々は、限られた人員とコストで国際的な競争力を維持するため、AIやシミュレーション技術を活用した創薬プロセスの効率化と高度化を進めている。その一環として、創薬DXプラットフォームの研究開発に注力している。具体的には、創薬プロセスの上流から下流に至る各ステップのAI・シミュレーション技術（創薬標的探索や薬効・毒性等の活性予測やメカニズム解明、さらにはそれらを最適化条件とする化合物デザイン、臨床データからの副作用要因抽出などの計算技術）の開発を行ってきた。例えば、製薬企業数社の化合物データを共有し、化学構造から活性・ADMETを予測するAIであるGNNモデルや基盤モデルの開発を行ってきた。また、マルチオミクスなどの実験データ、臨床データなどの多種多様なデータを用いて、患者層別化、サンプル分類、分子メカニズムの解明、バイオマーカー推定、創薬標的分子探索などのAI技術も開発している。本講演では、演者が取り組む具体的な事例を紹介しつつ、創薬におけるAIの現状と未来についてお話ししたい。