

## 人工知能(AI)およびビッグデータ(BD)統合による「化学データサイエンス」

-----計算毒性学、創薬、物性評価、他への展開(1)-----

"Chemical data science" by artificial intelligence and big data

Development to Computational toxicology, Drug discovery, Property evaluation and others (1)

## 開催趣旨:

情報関連では AI、IoT、IT、そしてビッグデータとそれぞれが急速に拡大、発展し続けており、今後はさらにこの拡大傾向が続いてゆく。現在は急速に発展し続けるこれらの技術について様々な適用研究が実施され、多くの発表がなされている。本来、AI、IoT、IT、そしてビッグデータといった項目はそれぞれが深く関与しており、これらをまとめて研究することで、より高度な解析を実現することが可能となる。

最近、これらの学問分野を総合的に扱うための研究分野として「データサイエンス」分野が急速に注目を集めている。このデータサイエンスは様々な分野に適用できる汎用的な技術を基本として構成される。化合物を扱う研究分野では多くのデータが化合物関連データで占められている。従って化合物分野では「化学データサイエンス」という新たな研究分野が必要となる。

日々拡大し続ける AI、IoT、IT、そしてビッグデータを総合的に扱い、その集積効果を発揮することで、従来にはない新たな発見や展開につながる次世代型研究の実施が可能となる。本フォーカストセッションでは、現在大きなテーマとなっている AI(人工知能)に関する研究発表と一般的な事項での人工知能の基本事項等に関する発表をいただく。また、今後 AI、IoT、IT、そしてビッグデータ時代の大きな研究トレンドとなる「化学データサイエンス」に関する討論を行い、その展開型である「創薬データサイエンス」、「毒性データサイエンス」、「物性データサイエンス」等について考察する。

## モデレーター: 湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta

株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa

明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University

生島 高裕

株式会社 数理先端技術研究所

Mathematical Science Advanced Technology Laboratory CO., Ltd.

## 1. 計算毒性学における人工知能、そして進化する「化学データサイエンス」世界への展開

湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta

株式会社 インシリコデータ

計算毒性学においては人工知能(AI)の適用が探られ、様々なアプローチが試みられている。現在 AIを含めて IT、IoT そしてビッグデータが急速に規模を拡大し、データサイエンスの分野が注目されている。本講演では、化合物をあつかう分野での AI、IoT、IT、そしてビッグデータを総合的に用いた「化学データサイエンス」による創薬、毒性、物性等への適用を考察する。

## 2. 人工知能の創薬初期プロセスへの応用の可能性

原 秀人 Hideto Hara

武田薬品工業株式会社 薬剤安全性研究所

医薬品開発の成功確率を上げるため、過去の膨大なデータを人工知能によって学習させ、その結果を創薬の初期プロセスに活用させることへの期待は大きい。弊社においても過去十年以上に亘り実施されたスクリーニングデータを用いて、動態特性や毒性を予測する QSAR モデルの構築や、プロファイル改善のための構造変換ナレッジ抽出などを実施し、化合物のデザイン支援に利用している。本講演ではそれらの取り組みの一端を紹介する。

## 3. 人工知能(AI)による適食・適薬デザインの可能性

生島 高裕 Takahiro Ikushima

株式会社 数理先端技術研究所

近年人体にとって最適な食品のとりかた、薬の飲み方が話題になっている。そのデザインにおいてディープラーニングなどの新しいアルゴリズムの可能性が模索されており、AI 技術最先端企業がその方向へ相次いで進出している。その課題を明確にし、各研究所・企業の戦略と技術を明らかにする。また使用されているアルゴリズム詳細、プログラム言語、各ツールの API の種類や特徴に関する解説を行い、課題解決の可能性を探る。