

AIによるデータ駆動型研究が拓く創薬と医療
Data-driven drug discovery and healthcare by artificial intelligence

山西 芳裕
Yoshihiro Yamanishi

九州工業大学 大学院情報工学研究院 生命化学情報工学研究系
Kyushu Institute of Technology

近年の生命医科学では、疾患に関するゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム、フェノーム、インターラクトームなどのマルチオミクス情報が得られるようになり、生体内分子の網羅的解析が可能になった。同時に、膨大な化合物や薬物に関する生物活性情報も蓄積されている。このようなビッグデータ時代において、人工知能 AI の重要性が高まってきており、多様な医薬ビッグデータの融合解析から創薬や医療に繋げる役割が求められている。

本研究では、疾患に関するマルチオミクス情報・臨床情報、化合物に関する化学構造・遺伝子発現・標的分子情報などの医薬ビッグデータを融合解析し、創薬や医療における様々な課題を解決するための機械学習アルゴリズム (AI 基盤技術) の開発を行った。疾患・生体分子・医薬品候補化合物ネットワークを大規模に予測するデータ駆動型アプローチであることが特色である。医薬品候補化合物の標的タンパク質をオフターゲットも含めて明らかにし、その作用機序をパスウェイレベルで考察することが可能になる。当日は、ドラッグリポジショニング、創薬標的探索、ネットワーク創薬、シナジー創薬、細胞直接変換リプログラミング、医薬品分子構造設計への応用例をいくつか紹介する。