

失敗は成功の母！創薬 AI の精度向上

失敗例を 1,000 倍学ばせると誤分類が 100 分の 1 以下に

■本件リリースのポイント

- 創薬の成功率は数万分の 1 と言われるほど低く、生産性の向上が求められている
- AI（人工知能）の活用により、新規の活性化化合物を効率的に見つける方法を見いだした
- AI に学習させるデータとして、生物活性を示さない負例の割合を 1,000 倍増やすと、誤分類が 100 分の 1 以下になった
- 従来法との比較により、新しい化合物が抽出できることも、同時に明らかにした
- AI の精度向上で AI を活用した創薬への幅広い応用が期待できる

■概要

学校法人関西医科大学（大阪府枚方市 理事長・山下敏夫、学長・友田幸一、以下「関西医大」）附属生命医学研究所分子遺伝学部門木梨達雄教授と池田幸樹助教、学校法人常翔学園（大阪市旭区 理事長・西村泰志）摂南大学（大阪府寝屋川市 学長・荻田喜代一）薬学部（同市 学部長・佐久間信至）化学系薬学分野表雅章教授、河合健太郎准教授らの研究チームは、創薬研究における AI（人工知能）の活用について検討し、活性化化合物を効率的に見つけるためには、生物活性を示す化合物だけでなく、生物活性を示さない化合物も AI の学習に重要であることを明らかにしました。

【本件リリースに関する取材のお問合せ先】

学校法人 関西医科大学 広報戦略室（岡田・畑森）

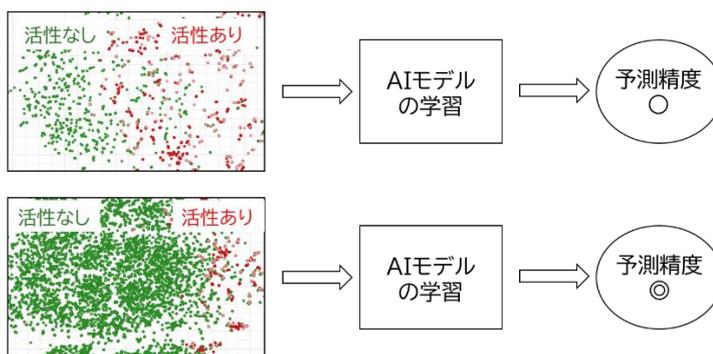
〒573-1010 大阪府枚方市新町 2-5-1

電話：072-804-2128 ファクス：072-804-2638 メール：kmuinfo@hirakata.kmu.ac.jp

■概要

創薬の成功確率は低く、生産性の向上が求められています。近年では、AIの活用による化合物探索の効率化が試みられており、ディープラーニングをはじめとした多くの方法論が提案されていますが、AIの学習データに着目した研究は、ほとんど行われていませんでした。また、一般の創薬手法で用いられる「High Throughput Screening (HTS)」ではヒット率が0.1%以下にとどまると言われています。これまでの創薬では数少ないHit化合物のみに着目し、数多く得られる“失敗したデータ”群については十分に活用されておらず、ただ捨てられるだけとなっています。

本学と摂南大学の研究チームは、この創薬分野におけるデータの特徴、すなわち化合物の大部分が活性を示さないという特徴に着目。AIの学習において、活性を示す化合物（正例）に対して、活性を示さない化合物データ（負例）の割合を1,000倍増やすと、AIの誤分類が100分の1以下になり、識別能力が格段に向上しました＝図。



図：活性を示さない化合物を多く用いて学習させると、予測精度が向上

この知見を利用することで、より少ない検証回数や薬剤リソースでスクリーニングを行うことが可能となり、創薬研究における大幅なコストダウンに繋がる幅広い応用が期待できます。この論文は、3月18日（木）に学術誌の「molecular informatics」（インパクトファクター：2.741）に掲載されました。

<https://doi.org/10.1002/minf.202060040>

■書誌情報

掲 載 誌	「molecular informatics」
論文タイトル	Effect of Learning Dataset for Identification of Active Molecules: A Case Study of Integrin α IIb β 3 Inhibitors
筆 者	Kentaro Kawai, Mami Tomonou, Yume Machida, Yukiko Karuo, Atsushi Tarui, Kazuyuki Sato, Yoshiki Ikeda, Tatsuo Kinashi, Masaaki Omote.

【本件リリースに関する取材のお問合せ先】

学校法人 関西医科大学 広報戦略室（岡田・畑森）

〒573-1010 大阪府枚方市新町 2-5-1

電話：072-804-2128 ファクス：072-804-2638 メール：kmuinfo@hirakata.kmu.ac.jp

■内容に関するお問合せ先

学校法人関西医科大学
附属生命医学研究所 分子遺伝学部門 教授
木梨 達雄
同部門 助教
池田 幸樹
大阪府枚方市新町 2-5-1
TEL：072-804-0101
E-mail：ikedayos@hirakata.kmu.ac.jp

学校法人常翔学園摂南大学
薬学部 化学系薬学分野 准教授
河合 健太郎
大阪府枚方市長尾峠町 45-1
TEL：072-800-1235（不在の場合は常翔学園広報室へ）

■本件発信部署・取材のお申し込み先

学校法人関西医科大学
広報戦略室
担当：岡田、畑森
TEL：072-804-2128
E-mail：kmuinfo@hirakata.kmu.ac.jp

学校法人常翔学園
広報室
担当：大野、坂上
TEL：072-800-5371
携帯：090-3038-9892

■資料配信先一覧

科学記者会
枚方記者クラブ

厚生労働記者会

厚生日比谷クラブ

【本件リリースに関する取材のお問合せ先】

学校法人 関西医科大学 広報戦略室（岡田・畑森）
〒573-1010 大阪府枚方市新町 2-5-1
電話：072-804-2128 ファクス：072-804-2638 メール：kmuinfo@hirakata.kmu.ac.jp