

(公社) 日本放射線技術学会 第 65 回近畿支部学術大会

特別講演

「データサイエンスによって広がる創薬の可能性」

滋賀大学 データサイエンス教育研究センター 江崎 剛史

1つの薬が承認されて市場に出るまでには、膨大な研究開発費用と時間がかかる。ここ数十年では研究開発費用は高騰しているにも関わらず、新薬の承認数は停滞しているという事実も、新薬の開発の難しさを物語っている。そこで新薬創出を支援することを目指し、人工知能 (Artificial Intelligence: AI) を始めとしたデータサイエンスの手法を用いた予測システムが注目されている。「化合物の構造から薬らしさを予測する」ことができれば、多くの時間や費用を費やしていた化合物選定や基礎実験を省略できるのではないかと期待されている。また、ベテランの創薬研究者が持つ「薬になり易そうな化合物を探す視点」を学習させることができれば、より薬効が高く副作用の少ない薬に仕上げることができると考えられる。それらの期待から、実際に創薬において AI などのデータサイエンス手法の利活用が進められている。

本講演では、創薬の効率化を目指して広がってきたデータサイエンスの活用事例を紹介するとともに、自身の研究遂行において生じたデータサイエンスの課題と自動化への取り組み、そして今後の展望について述べる。