



2021年4月28日配信【No.2】 <<配信枚数 2枚>>

失敗は成功の母！創薬AIの精度向上

失敗例を1000倍学ばせると誤分類が100分の1以下に

摂南大学（学長：萩田喜代一）薬学部の表雅章教授と河合健太郎准教授は、関西医科大学の木梨達雄教授、池田幸樹助教との共同研究で、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1000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

■内容に関するお問い合わせ先

摂南大学 薬学部薬学科

准教授 河合健太郎

TEL: 072-800-1235（不在の場合は常翔学園広報室へ）

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、助教 池田 幸樹

TEL:072-804-0101 E-mail: ikedayos@hirakata.kmu.ac.jp

■本件発信部署・取材のお申し込み先

学校法人常翔学園 広報室(担当:大野、坂上)

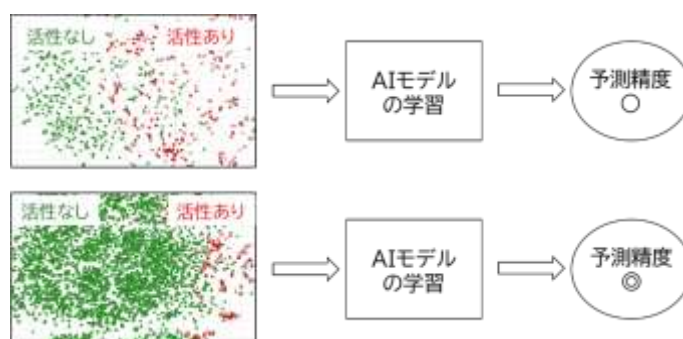
TEL:072-800-5371 携帯:090-3038-9892

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

<研究概要>

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。本学と関西医科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1000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日に学術誌の *molecular informatics* に掲載されました。

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

以上