

計算毒性学と人工知能(2):毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト(AI-SHIPS プロジェクト)

Computational toxicology and artificial intelligence (2): AI-Substances Hazardous Integrated Prediction System (AI-SHIPS) Project

開催趣旨:

近年、人工知能を毒性予測に適用する気運が高まっている。経済産業省では今年度より「毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト(AI-SHIPS プロジェクト: PL・船津公人)」を開始した。本セッションでは多様な知を統合することにより化学物質のリスク評価の達成を目指すプロジェクトの概要と、人工知能の最新知見について紹介していただく。

モデレーター: 船津 公人 Kimito Funatsu

東京大学 The University of Tokyo

植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa

明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University

湯田 浩太郎 Kohtarō Yuta

(株)インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

1. 経済産業省委託事業“毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発(AI-SHIPS)”について

庄野 文章 Fumiaki Shono

東京大学 The University of Tokyo

近年、人工知能を毒性予測に適用する気運が高まっている。経済産業省では今年度より「毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト(AI-SHIPS プロジェクト)」を開始した。本セッションでは多様な知を統合することにより化学物質のリスク評価の達成を目指すプロジェクトの概要と、人工知能の最新知見について紹介していただく。

2. 溶解度など基本物性の計算予測の試行

福西 快文 Yoshifumi Fukunishi

産業技術総合研究所 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

物質の吸収、代謝、毒性の評価で、もっともわかりやすい指標は、水溶解度、脂溶性、膜透過係数などの物理量である。これらの量は、比較的明確に定義されている。水に溶けなければ、生物に取り込まれる量は少なく、脂溶性がなければ膜を透過もしなければ、蓄積もしない。基礎的な問題なので、計算アプローチも多く、精度の低い計算なら比較的容易に計算できるが、一方で科学的に豊富な内容も持っている。今までの演者らの取り組みを紹介したい。

3. AIと毒性予測 ～システムハウスの視点から～

山本 真司 Shinji Yamamoto

システム計画研究所 Research Institute of Systems Planning, Inc.

弊社の経験した事例に基づき、AIの一般的な開発ステップを紹介し、システムハウスの視点から、AI開発における学習データの重要性をお話しします。その後、tox21やChEMBLなど種々のデータセットの学習データとそれらを解析する様々な手法のサンプルコードを提供するスタンフォード大学のDeepChemプロジェクトについてご紹介いたします。

4. 富士通の人工知能を支える最先端の学習技術とその適用

丸橋 弘治 Koji Maruhashi

株式会社富士通研究所 Fujitsu Laboratories Ltd.

本講演では、富士通のAI技術のブランドである“FUJITSU Human Centric AI Zinrai”を支えるAI技術について、特に学習技術を中心に、適用の事例を交えながら紹介する。具体的には、従来のDeep Learningでは適用が困難であった、高度に複雑な時系列データの分類問題や、人やモノのつながりを表すグラフデータの分類問題に適用可能な新技術について、実践事例を紹介する。