

AI 創薬の要素技術・関連技術とその可能性
Elemental and related technologies for AI drug discovery and their potential

小寺 正明
Masaaki Kotera

株式会社 Preferred Networks
Preferred Networks, Inc.

創薬研究開発は、標的探索、ヒット創出、リード最適化から、非臨床研究、臨床研究、製造、市販後調査に至るまでの長い工程全てを考慮した上で行われるのが望ましいと考えられます。この中で、いわゆる AI と呼ばれる情報技術が適用可能なタスクにはどのようなものがあるのでしょうか？ 基本的にはどのステージにおいてもそのようなタスクは存在しますが、適用によりパフォーマンスを向上させるには、それぞれのタスクの特質をよく理解しなければなりません。今回の講演では、標的探索・ヒット創出・リード最適化の工程に焦点を当てて、AI の活用事例について紹介します。具体的には、深層学習を用いた分子設計により引き起こされる創薬研究のパラダイムシフトや、その要素技術や関連技術、そして化合物同定の実例などについて説明します。