

目指せ！データサイエンティスト

7 薬の開発編

滋賀大学の 江崎先生の解説

今回は薬の開発での データサイエンスの活用について紹介します

新しい薬の開発には、長い時間とたくさんのお金が必要です。薬のもととなる化学物質を探し出す作業はとても大変で、「宝探し」と例えられることもあるほどです。元々はこの作業を手作業で行っていましたが開発にかかる時間とお金を少しでも減らすため、AI（人工知能）の活用が注目されています。

AIを使って薬のもととなる 化学物質を見つける！

AIを活用することで効率的に薬の開発ができるようになりました。特に、薬のもととなる数万種の化学物質の中から、目的とする病気に効きそうなものを短時間で探し出す技術が注目されています。

AIは、化学物質のデータを使ってどのような効果や副作用※が起きるかを予測し、効果や副作用の観点から性質が良いものを探します。そうして、目的とする病気を治す薬の開発をめざすのです。

※薬を使った時に起こる目的以外の反応のこと

データサイエンスとは？

大量の情報やデータを分析して役に立つ情報を得たり、将来の予測を立てたりする研究のことです。



監修：江崎 剛史（滋賀大学データサイエンス学部准教授）

制作：滋賀大学データサイエンス・AIイノベーション研究推進センター、近江テック・アカデミー

マンガ：岡本 圭一郎

膨大な候補、AIが絞り込み

江崎先生 人間が何万種類もの化学物質から薬になりそうなものを選ぶのは不可能だけど、AIを使えば人間が選べるぐらいの数、例えば数百ぐらいにまで絞り込めるようになってきているよ。

かなで AIは化学物質のどんなデータを用いて、効果や副反応を予測するんですか。

江崎先生 化学物質の分子構造の情報を学習して予測するよ。構造が部分的に変われば効果も変わる。構造を部分的に変えた化学物質と副反応のデータを膨大に学習したAIを使って絞っていくんだ。現状では薬の開発には10年以上かかるというけれど、AIを活用すれば20年後には開発期間を半分以下にできるという報告もあるよ。（構成・編集部）

江崎先生 学6年生）かなで（小）

おしえて先生！