

既存薬、他病気へ効果予測

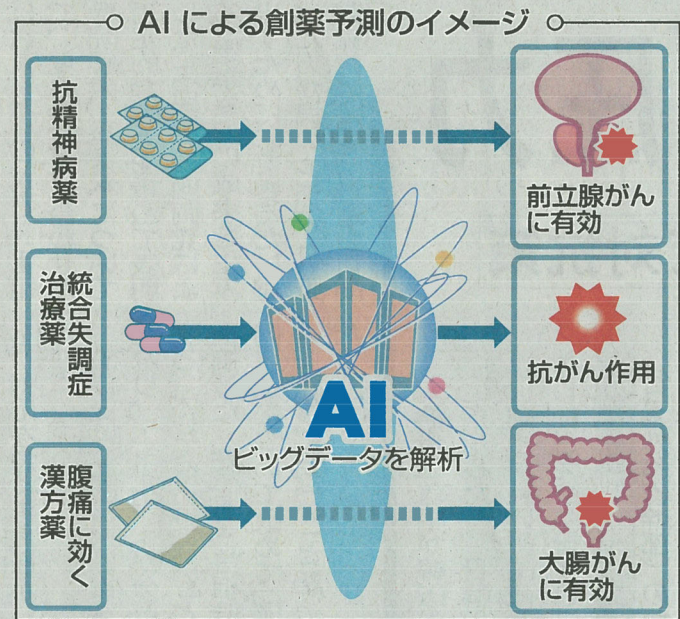
タンパク質異常AIで照合

九工大教授 システム化



山西芳裕教授

蓄積された医療ビッグデータを人工知能(AI)で解析し、既存薬が全く別の病気に効くかどうかを予測する「AI創薬」システム



を、九州工業大の山西芳裕教授(生命情報学)が開発した。病気に違わずタンパク質の異常に着目。AIで類似パターンを探し当て、薬が代用できるかを照合する。従来とは違う新たな薬開発の手法として、既に大学病院や製薬会社と具体的な研究に乗り出しており、山西教授は「難病や希少疾病の治療薬の開発に欠かせない」と話している。

山西教授によると、がんや糖尿病、アルツハイマー病など多くの病気は、体内にある特定のタンパク質や遺伝子が異常を起こすことで発症する。治療薬は、タンパク質にくっついて、異常を抑えることで症状を軽減する。一方で、どの薬が

どのタンパク質に作用するのか全容の把握は難しく、未知の効能を持つ薬もあるという。

AI創薬の仕組みは、約1300の病気で現れるタンパク質の異常や、約8千個の薬の成分といった膨大なビッグデータを解析。異なる病気でも、タンパク質の異常が似る病気を関連づけ、薬の互換性を予測する。薬を細胞に投じた際の約2万パターンの遺伝子変化や、服用後の体の変化もAIに反映する。

「フェノチアジン」が前立腺がんの有効▽統合失調症の治療薬「ペンフルリドール」が抗がん作用を持つ▽腹痛に効く漢方薬「大建中湯」が炎症性大腸がんの有効—などと予測した。

薬の開発は一般的に、10年以上の期間や数百億円から数千億円の費用がかかる。途中で重い副作用が判明したり、大量生産が難しかったりすれば、実用化には至らないケースもある。

山西教授は既存薬や過去に開発に失敗した医薬品の成分を別の病気の治療に再利用する「ドラッグ・リポジショニング(DR)」の手法を採り入れた。従来は偶然の発見に頼りがちだったDRを、AIの能力によって飛躍的に効率化させた。

山西教授は「AI創薬は開発の低コスト化、迅速化につながる。AIのディープラーニング(深層学習)で予測の精度を上げ、5年以内の新薬開発を目指す」としている。(山下真)