

2021年5月25日

各位

**データ駆動型創薬の加速化をめざし
薬物スクリーニング用 AI 技術を構築**

田辺三菱製薬株式会社（本社：大阪府中央区、代表取締役社長：上野裕明、以下「田辺三菱製薬」）は、データ駆動型創薬の加速化をめざし、AI ベンチャー企業である株式会社 HACARUS（代表取締役 CEO 藤原健真、本社：京都市、以下「HACARUS」）の独自の AI 技術を活用することで、新たな薬物スクリーニング用 AI 技術を構築しました。

田辺三菱製薬は、これまで、大阪大学大学院基礎工学研究科・機能創成専攻 三宅淳教授らの研究グループ（現連絡先：大学院工学研究科）と共同で、ディープラーニングによる薬物スクリーニング用 AI 技術開発を研究し、この AI 技術によって、高い知識・技術を持った研究者による事前のデータ検討なしに大規模な画像を用いた薬物評価が可能になりました。

AI 技術をさらに活用するためには「計算リソースの大規模化」と「AI のブラックボックス化」という 2 つの課題がありました。これら 2 つの課題に対し、2020 年度より HACARUS が持つ独自の AI 技術の活用について検討を開始し、このたび構築した新しい AI 技術が薬物スクリーニングに有用であることが分かりました。

【今回の成果】

- ① スパースモデリング*を活用することにより、「計算リソースの大規模化」を解消し、一薬物当たり 15～40 分かかっていた解析時間を、約 16 秒まで短縮した。
- ② スパース構造学習によって、薬物投与の影響を受けた画像特徴量を推定することで説明可能となり、「AI のブラックボックス化」を回避した。

今回の成果については、将来的には、遺伝子多型に着目した薬物スクリーニングや患者 iPS 細胞などを用いた薬物スクリーニングに応用することで、当社が中計 21-25 で注力するプレジジョンメディシンの実現に貢献すると期待しています。

田辺三菱製薬は、これからも社内外の様々な技術を活用しながら、アンメット・メディカル・ニーズが残る疾患への創薬にチャレンジしてまいります。

田辺三菱製薬株式会社 コミュニケーションクロスローズ部

（お問合せ先） 報道関係者の皆様 TEL：06-6205-5119

*約 25 年の歴史を持つ技術。始まりは諸説あるが、スタンフォード大学の Robert Tibshirani 教授が LASSO を提唱したことによって、データサイエンスなどの分野で広く認知されるようになった。この間、アカデミアでは研究が進んだが、ビジネスでの実践・応用例はまだまだ少ない。

■ 株式会社 HACARUS (ハカルス) について

HACARUS は、スパースモデリング技術を AI に応用し、少ないデータで、本当に役立つデジタルソリューションの提供をいたします。7 年以上に渡り数多くの企業の問題解決に貢献してきた HACARUS ならではの経験と技術力で、人の知見を資産化し、オペレーションの効率化・省人化を成功させます。データの取得から既存システムとの連携までを一貫して支援し、人間と AI が共存する未来の実現に取り組んでまいります。詳しくは <https://hacarus.com/ja/> をご覧ください。

