

創薬の未来を切り開く

CASの革新：データとAIがもたらす新時代



シニアプロダクトマネージャーのラヴィッツ氏(左)、ディレクターのサンフォード氏(中央)、日本代表の磯辺千春氏

米国化学会の科学情報管理のスペシャリストであるCASは化学の研究者向けサービスでの実績を基盤に、ライフサイエンスへの事業の幅を広げている。今年は創薬研究者向けに開発した新たな情報ツール「CAS BioFinder Discovery Platform (TM)」の提供を開始した。これにより、既知および予測されたデータを探索し、疑問に対する答えを迅速かつ確実に見出し、前臨床創薬プロセスの加速を支援する。人工知能(AI)の活用が進むなか、成否の鍵となるデータを整備する「コンテンツパートナー」としても、研究開発を支えていく。

情報を通じ科学の進歩へ貢献

CASは、化学研究の出版物を整理するボランティアの活動として1907年に設立され、1956年から正式に米国化学会の独立した事業部門として活動している。さまざまな呼び名を持つ化学物質を同定する手段として世界的に利用されているCAS登録番号は、CASが付与・管理している。

「CAS SciFinder Discovery Platform」の提供で数十年にわたる実績がある。化学と生物学にまたがる膨大な特許文献やジャーナル文献にアクセスできる情報ツールで、専門家が実際に目を通したうえで文献を関連付けることで、ユーザーは必要とする情報に迅速かつ確実にたどり着ける。とくに遺漏が許されない特許や規制などははじめ、最新の情報を日々追加し網羅性を担保している。反応経路の探索や、研究に必要な材料のサプライヤーを特定・比較することもできる。化学・生物学に関わる研究者にとってはなくてはならないツールとなっている。

化学からライフサイエンスへ

「CAS BioFinder Discovery Platform」は、CAS SciFinderを通じ、イノベーションを求める科学者への情報ソリューションで不動の地位を築いた実績を元に、創薬研究者向けに開発した新たな情報ツール。生物学的配列、構造活性関係データ、ADME測定、毒性、疾患や薬物に関連するバイオマーカーデータなどの豊富な科学的知識に、独自のAI搭載技術と直感的で視覚的なインターフェイスを組み合わせた。創薬研究では従来、複数データベースにアクセスする必要があったが、包括的なCAS BioFinderにより、これらを一元化できる。

「創薬は通常、たんぱく質から始まる。そこでCAS BioFinderでは、標的とするたんぱく質、例えば、がんに関係するCOX-1に注目するなら、これに対する生理活性が知られている9000以上のリガンドを見つけれられる。ここからユーザーは、目的に応じて、水素結合のドナーとアクセプターの数や分子量、体内の組織にどのように浸透するかなどの特性により絞り込んでいく。リガンドの活性プロファイルから、ターゲットとしていたものとは別のたんぱく質との相互作用も分かる。これは新しい治療法を開発する契機にもなり得る。」(開発者のオーア・ラヴィッツ氏)

「低分子治療薬の開発に焦点をあて、2~3年を費やして低分子の薬理学的生理活性のデータベースを構築した。これはスタート地点。目標は世界中であらゆる創薬を支援することにある。年内には創薬のための生物学的基盤とも呼べるコンテンツを完了させ、2025年から26年にかけて、免疫治療薬、抗体ベースの治療法、RNA治療などに広げていく。そう遠くない将来、CASが化学と同じくらい生物学の世界でも知られるようにしたい。」(同アダム・R・サンフォード氏)

今年5月の提供開始以来、数カ月の間にトライアルベースのユーザーは数百人規模に広がった。今後3~4カ月ごとに新しいコンテンツと機能を加え、生理活性に焦点を当てた低分子創薬からバイオマーカーへと、さらに抗体やペプチド、抗体薬物複合体(ADC)など、高分子治療薬へと拡張させていく。

将来的には、一つの標的が実際どのように病気の生物学的メカニズムに関与しているかや、抗体療法、遺伝子療法、細胞療法など、さまざまな治療法において、文献上のような適応があるのかについて知ることでもできるようにする。生理活性ばかりでなく、毒性など他の領域にも予測機能を追加する。

「ライフサイエンスサミット」開催

CASではライフサイエンス分野でのサービスの拡充と平行して、日本の創薬研究者とも対話を重ねている。今年9月には都内で開催した「CASライフサイエンスサミット」では、とくにAIの活用に焦点を当てた。AI活用の先進的な事例が報告され、CASの経営層と日本の製薬会社の開発のエグゼクティブらがAI、機械学習(ML)に関して積極的に意見を交わした。

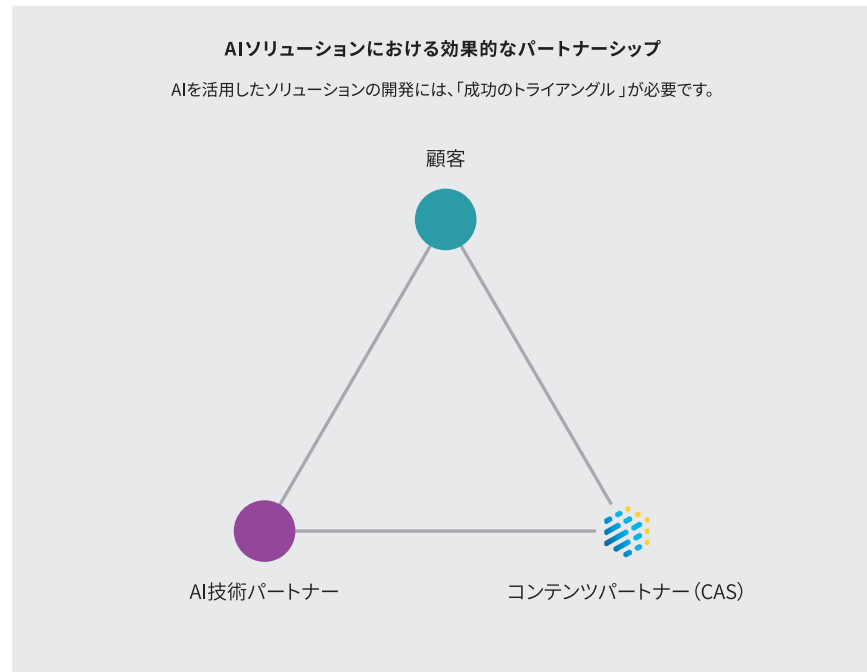
創薬研究でAIの活用が進む背景には、対象とする生命現象が複雑なものになっていることや、医薬品の選択性と安全性への要求が高まっていることに加え、イノベーションのスピードと成功の確率が重視されるようになってきている現状がある。

歴史的には化学に焦点を当てた組織として知られているCASが、実際のコアコンピテンシーは非常に複雑なコンテンツのナレッジマネジメントにある。多くの組織がAIの導入に取り組むなか、データの品質と包括性が高水準であれば、AIは大幅に強化できることが分かってきた。



マヌエル・グズマン氏
CASプレジデント

AIによって、創薬の効率を高め開発期間を大幅に短縮できる。そのためライフサイエンス企業はこの5~7年AIに投資し、独自の技術を利用してきた。ただこの先は、単独では難しいとの認識されるようになってきている。AI技術のプロバイダーとともに、信頼のできるコンテンツ(データ)の専門家と一連の関係を築く必要がある。われわれはこれを『成功のトライアングル』と呼んでいる



AI活用のコンテンツパートナーに

CASのマヌエル・グズマンプレジデントは、AIの登場による創薬の現場の変化について、「AIによって、創薬の効率を高め開発期間を大幅に短縮できる。そのためライフサイエンス企業はこの5~7年AIに投資し、独自の技術を利用してきた。ただこの先は、単独では難しいとの認識されるようになってきている。AI技術のプロバイダーとともに、信頼のできるコンテンツ(データ)の専門家と一連の関係を築く必要がある。われわれはこれを『成功のトライアングル』と呼んでいる」と語り、「私たちは科学的イノベーションのための信頼できるコンテンツパートナーになりたいと考えている」との意欲を示している。

CASではここ数年、CAS Content Collection(データベース)の拡充やライフサイエンスの研究者のワークフローをカバーするソリューションの拡大に大規模な投資を進めてきた。一方製薬会社は独自のデータを持ち、データ使用のライセンスも取得してきたが、これらを一緒に使用できるようにするのに苦労している。「われわれには、非常に複雑な科学情報を大量に扱うためのコンテンツ管理とナレッジ・マネジメントの能力がある。これにより、データを調和させ、製薬会社のコンテンツと統合、適合させることができる」(グズマンCEO)。