

AI天然物創薬研究

～AI機械学習を用いた天然物由来の医農薬シーズ探索～

生命科学研究部附属
グローバル天然物科学研究センター

塚本 佐知子

目的とするSDGsゴール



1. 研究の概要



本研究では、AI機械学習を用いた生物画像の解析モデルを天然物の生物活性評価に応用し、世界初となる天然物エキストラライブラリの表現型スクリーニングを行う。本研究により天然物創薬研究においてAI機械学習を基盤とする迅速かつ正確な評価技術確立するとともに、医農薬シーズとなる有用天然物を発見する。

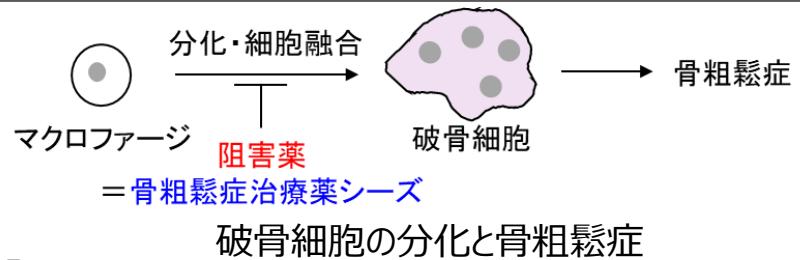
2. 研究の目的

古来、多様な構造を有する天然物は、医農薬のシーズとして利用されてきた。本研究では、**AI生物画像解析技術と天然物探索技術を融合した効率的な天然物スクリーニング技術確立**し、申請者が保有する天然物エキストラライブラリから革新的医農薬シーズを発見する。

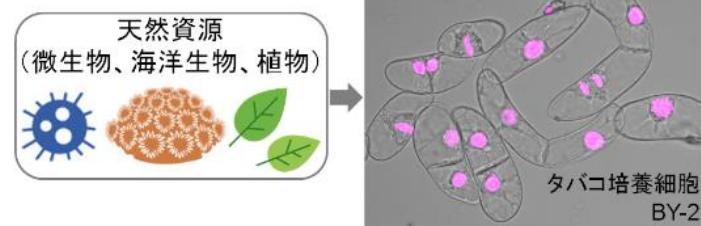
3. 今年度実施した研究

・本年度中の研究の取組

- AI画像分類モデルを用いた骨粗鬆治療薬シーズの探索
破骨細胞の分化阻害活性を自動画像解析により評価できるAI画像分類モデルを構築し、天然物ライブラリをスクリーニングした。
- タバコ培養細胞選択的に成長抑制作用を示す農薬シーズの探索
タバコ培養細胞とヒト由来培養細胞に対する毒性試験を実施し、植物選択的に成長阻害作用を示す天然物をスクリーニングした。



植物細胞の成長に関するアッセイ系



タバコ培養細胞を用いた農薬探索

・上記の取組によって生まれた成果 (SDGs達成へどのように貢献するのか)

破骨細胞の分化阻害活性を効率的かつ高精度で評価できる画像分類モデルの構築に成功した (右図)。また、天然物ライブラリのスクリーニングにより、破骨細胞の分化阻害作用を示す天然物を複数見出した。本研究で構築した天然物スクリーニング技術は、天然物創薬研究の革新的な基盤技術となるものであり、SDGsで掲げる「**目標9. 産業と技術革新の基盤を作ろう**」に貢献する。

また、タバコ培養細胞を用いた天然物スクリーニングにより、植物細胞選択的に成長抑制作用を示す天然物を見出しており、除草剤開発のシーズとして期待される。農薬は農業生産性を向上させ「**目標2. 飢饉をゼロに**」の達成につながる。そして、農業生産性の向上に伴う収益の増加は、やみくもな農地拡大を防ぐことにつながるので、「**目標15. 陸の豊かさを守ろう**」に対する貢献が期待される。

・今後の展望

本研究で構築したAI天然物創薬技術を用いて天然物スクリーニングを展開することで、画期的な医農薬品シーズとなる天然物の発見が期待される。医薬品シーズの創出は、「**目標3. すべての人に健康と福祉を**」の達成につながる。また、今後AI画像分類モデルを用いた評価方法を水産用医薬品の開発に展開することで、「**目標14. 海の豊かさを守ろう**」にも貢献することが期待される。

