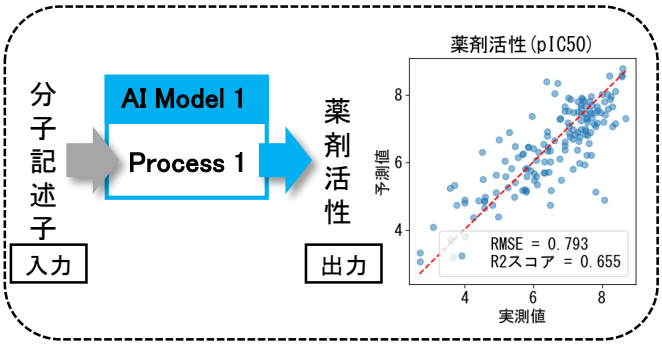
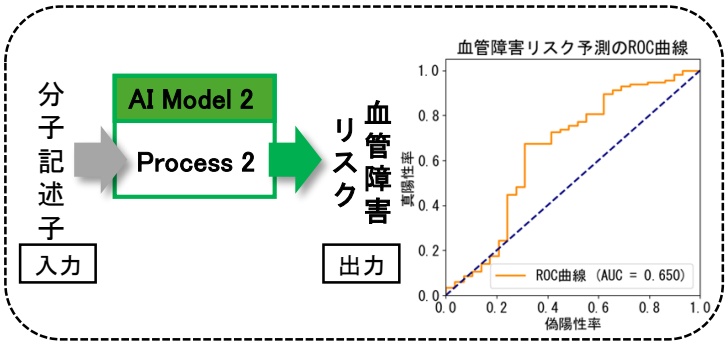
Multi-Sigma®を利用した医薬品開発分野での予測モデルの組合わせと多目的最適化

株式会社エイゾスのAI解析プラットフォームMulti-Sigma®のAI連鎖解析機能と多目的最適化機能を用いて、アルツハイマー治療薬として期待されるBACE阻害剤について、薬剤活性(pIC50) とその副作用の最適なバランスを探索した事例をご紹介します。

1. 薬剤活性と副作用(血管障害リスク)の予測

Multi-Sigma®のAI予測機能では、入力データ(説明変数)と出力データ(目的変数)を用いてAIモデルを学習させ、両者の関係性を捉えたモデルを構築することが可能です。

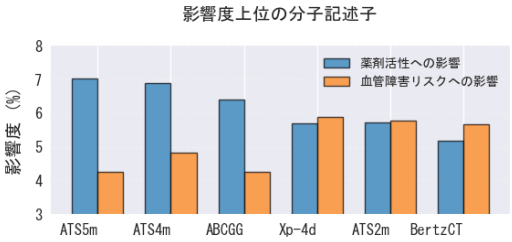




2. 薬剤活性と副作用(血管障害リスク)に強い影響を示す分子記述子の要因分析

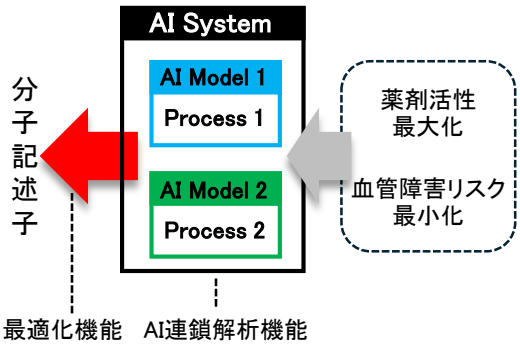
Multi-Sigma®の要因分析機能では、薬剤活性と血管障害リスクのそれぞれに対して寄与する分子記述子を特定することができます。

薬剤活性への影響が大きい分子記述子	1. ATS5m: +7.02% 2. ATS4m: +6.89%
血管障害リスクへの影響が大きい分子記述子	1. Xp-4d: +5.88% 2. ATS2m: +5.77%

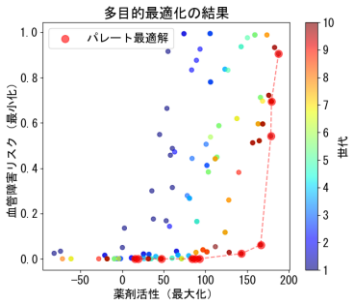


3. 薬剤活性と副作用(血管障害リスク)を最適化する分子記述子の探索

Multi-Sigma®のAI連鎖解析機能と最適化機能を組合せて、薬剤活性を最大化して、血管障害リスクを最小化する分子記述子の組合せを提案することができます。



Multi-Sigma®のAI連鎖解析機能を使用し、多目的最適化を行いました。その結果、薬剤活性(pIC50値)166.2、血管障害リスク0.062という解を得ることができました



(注)データセット: NCIデータベースおよびMoleculeNetから取得した分子データ。Mordredモジュールにより算出した分子記述子を使用。

株式会社エイゾスは、Multi-Sigma®、AIコンサルティング、条件出し支援、受託研究開発などのAIサービスを提供しています。
Multi-Sigma®は、研究開発向けのクラウドAIソフトウェアで、実験の手間を大幅に削減し、最小限の実験データセットで研究者の実際の問題に対する革新的な解決策を見出す支援を可能とします。

〒305-0031 茨城県つくば市吾妻1-5-7
https://aizoth.com/service/multi-sigma/
info@aizoth.com

© 2024 AIZOTH Inc. All rights reserved. AIZOTH and Multi-Sigma is registered trademarks of AIZOTH Inc.
All other marks are trademarks or registered trademarks of their respective holders.

AIZOTH