

# AIによる大量殺戮の危険性も

## 第II相へ歩を進める「創薬活用」

神戸市議会議員・元国会議員政策担当秘書 岡田裕二

「AI創薬の人類史における重要なマイルストーンだ」

23年6月、発見からデザインまでAIが主導した新薬を、第II相試験まで進めることに成功した香港インシリコ・メディシンのアレックス・ザボロンコCEOは熱っぽく語る。「AI主導創薬」がよいよ人体で試される、確かに史上初めてのことだ。

今や、AIは製薬産業のさまざまな分野で活躍している。新薬候補物質の探索、既存の薬物を別の疾患治療薬として開発するリポジショニング、薬物適応症と反応性の予測、臨床試験の成功率の予測、薬物が作用する標的タンパク質の構造予測など、多岐にわたる。新薬開発はひとつの新薬が市場に出るまでに平均10年以上かかる長丁場の事業だ。有望な候補物質5000〜1万個を発掘するのに、まず5年ほどかかる。発掘された候補物質のうち、臨床試験の前後

階までに至るのはせいぜい10〜25個だ。その半分が臨床第I相へ。第II相にはさらに半分、第III相へも半分と絞られ、最終的に製品化できるのは、ひとつあるかないかに過ぎない成功率だという。

新薬開発の低い成功率と長期間・高コストという障壁克服のため、初期のR&D段階などでAIが活用されている。人間の研究者なら数十人がかりで数年間かかる作業を、100万件以上の論文探索と数十万個の化学物質探索が可能ならAIは、瞬く間に終わらせることができる。

韓国の製薬バイオ協会は、世界のAI創薬市場が22年の6億980万ドル（約860億円）から毎年平均45・7%成長し、27年には40億350万ドル（約5660億円）に達するとの予測を出している。アツヴィ、アムジェン、アストラゼネカ、ペーリンガーインゲルハイム、グラクソ・スミスクラ

イン、ヤンセン、イーライリリー、米メルク（MSD）、ノバルティス、ファイザー、サノフィ、ロシュなどのグローバル製薬会社が、AI新薬開発会社との連携を進め、し

のぎを削っている。黎明期から活躍する英国のAI創薬のスタートアップ企業エクセシシアは、新薬候補物質探索のためのAIアルゴリズムを開発し、技術商用化を経た後、20年初めに強迫性障害（OCD）治療のための薬物（DSP1181）の候補物質を発表した。大日本住友製薬（現住友ファーマ）との協力の下、AI設計の医薬品としては世界で初めて、第I相まで漕ぎ着けた（後に開発中止）。

エクセシシアによると、臨床試験に至るまでに平均5年ほどかかる開発過程は、AIを利用して12カ月に短縮されたとのこと。以後、同社は2年も経たないうちに抗がん剤（EXS121546）、アル

ツハイマー病治療剤（DSP10038）を開発し、第I相へと進めている。

薬物の標的タンパク質の構造解析、そして薬物とタンパク質の相互作用の予測などの分野でもAIにかける期待は大きい。AI囲碁プログラム「アルファ碁」を開発したことで知られるグーグルディープマインドは、20年末にタンパク質構造解析AI「アルファフォールド2」を発表。それまでX線結晶構造解析や低温電子顕微鏡法実験などを利用して、長いときには数十年かかった解析作業を、わずか数分から数時間程度に短縮する革新を起こして見せた。

その後、21年には米国ワシントン大学デイヴィット・ベイカー教授が率いる研究チームが新AI「ロゼッタフォールド」の開発に成功。ロゼッタフォールドはアルファフォールド2より少ないデータでも構造を予測できる優れたもので、

共に国際学術誌「サイエンス」の21年度の「ブレイクスルー・オブ・ザ・イヤー」で名を馳せた。

## 毒薬を創るAI

だが、新しい技術には優れた革新性と同じくらい意図せぬ危険性が伴う。22年3月、米国ノースカロライナ州のコラボレーション製薬の研究者らはAIと機械学習を悪用することで、生物化学兵器を生み出すことができるという論文を国際学術誌『ネイチャーマシンインテリジェンス』に掲載した。

彼らは、適切な薬物候補を探索するために「メガシン」というAIを用いていた。メガシンは物質の毒性が予測された場合は減点し、逆

に生体適合性が予測される場合は加点するように機械学習するアルゴリズム（計算方式）を備えている。あるとき、彼らは毒性と生体適合性の両方に加点するようアルゴリズムを変えてみたというのだ。そのうえで、誰でもアクセス可能な公開データベースとオープンソースソフトウェアを駆使し、半数致死量（LD50）モデルに基づいて、殺虫剤、環境毒素、既製医薬品のデータなどをメガシンAIに学習・訓練させた。その結果、6時間も経たないうちに4万個の毒性物質候補が発見されたという。

新たに設計された毒性物質のなかには、地球上で最も毒性の強い神経毒「VX」よりも強力だと予測される物質が数百種類も含まれていた。さらに驚くべきことは、このAIを訓練するために使用したデータセットに、神経毒の種類がひとつも含まれていなかったという事実だ。

世界でAIが激震を起こすなか、日本の医療現場は呑気だ。すでに問診やレントゲン診断、内視鏡検査システムなどの分野ではAIが実用化されている。19年に内科系

学会社会保険連合が行った会員医師へのアンケート調査では、「AI診療に79%が期待」「AI医療のミスが医師の責任に60%が納得」「AI診療に63%が診療報酬をつけるべきと考えている」「一方、「実際に使用しているのは2%」との結果だった。

医師会の態度も揺らいでいる。22年3月に日本医師会内の「生命倫理懇談会」がまとめた報告書「医療AIの加速度的な進展をふまえた生命倫理の問題」については、AIは診断結果について適確に答えることができても、その結論が導かれた理由を説明できない、という本質的な欠陥を抱えていると指摘した。

しかし「説明などなくても結果がよければそれでよいのであって、結果が導き出された理由を論理的に求める必要はない」という考え方があるのも事実」とも述べており、その具体例として、麻酔薬がどのようなメカニズムで作用しているか正確に説明できなくても、麻酔薬は麻酔薬を用いている、と指摘。挙句には、「十分な説明能力はあるものの精度80%の診断システムと、

ブラックボックスで説明はできないが精度95%の診断システムとがあったとき、我われはどちらを使うことになるだろうか」と戸惑いを訴える始末だ。

世界では診療の分野でもAIの発展は目覚ましい。世界最大の人口を誇るインドでは、AIを活用した精神科オンライン診療に注目が集まっている。テレビ会議、電話、オンラインチャットといった同期型相談モデルから、AIを活用した非同期型遠隔精神医学へと進化しつつあるという。

一方でベルギーでは、心を病んだ既婚男性が「チャイ」というAIとチャットした際に自殺を薦められ、言うがまま命を落とした事件が大きな論争を生んだ。多くのAI研究者は、AIチャットをメンタルヘルスに使用することに反対しており、AIはユーザーを助けるより害を及ぼす可能性のほうが高いと主張している。

AIは人類の救世主となるか、それとも大量殺戮の悪魔となるか。これも一重に人類次第である。いや、それすらもAIに聞いたほうが早いのだろうか。



インシリコ・メディシンのアレックス・ザボロンコCEO