

## インテージヘルスケア、AI創薬アカデミックプログラム (IAAP) を開始 医薬品候補化合物の創出に向けたアカデミアとの共同研究プログラム AI創薬プラットフォームを活用し、新薬開発を加速

株式会社インテージヘルスケア(本社:東京都千代田区、代表取締役社長:仁司与志矢)は、インテージヘルスケアらが提供する、新薬創出のための AI 創薬プラットフォーム「Deep Quartet (ディープカルテット)」などの新規化合物を得るサービスを活用し、アカデミアとの共同研究プログラムを開始します。

### 【背景と目的】

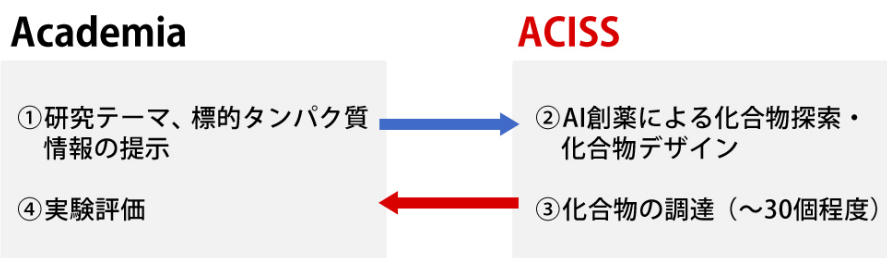
当社は、これまで多くの企業や大学などの研究機関に対して、AI やインシリコ<sup>※1</sup>による新薬開発支援サービスを提供してきました。特に AI 創薬プラットフォーム「Deep Quartet」などの新規化合物構造をデザインするサービスにおいて高い成果を生み出しています。

このたび、大学や研究機関などのアカデミアが持つ有望な研究テーマに対して、AI 創薬による新規化合物創出の技術を活用し、化合物提供までを行う共同研究プログラム「インテージヘルスケア AI 創薬アカデミックプログラム(略称、IAAP)」を開始します。海外では AI 創薬企業におけるアカデミアとの共同研究プログラムが数多く行われており、当社は本プログラムの実施により、国内の産学連携領域における新薬創出の加速に寄与することを目指します。

### 【インテージヘルスケア AI 創薬アカデミックプログラム (INTAGE Healthcare AI drug discovery Academic Program) の特長】

本プログラム (IAAP) は、AI 創薬による化合物探索・化合物のデザインおよび化合物の提供を行う、アカデミアとの共同研究プログラムです。

アカデミアの持つ研究テーマに対して、当社が標的タンパクや既知のリガンドなどの前提条件にもとづき、最適な AI 創薬の計算アプローチを検討。さらに化合物の探索およびデザインから化合物の提供までを行います。また、提案・提供された化合物に対しアカデミアが *in vivo*<sup>※2</sup> または *in vitro*<sup>※3</sup> の評価実験を行い、新薬の候補化合物(シード・リード化合物)を見出します。



本共同研究プログラムは、実践的な AI 創薬の事例を創出するとともに、さらなる新薬開発のプロジェクトとして進め、製薬企業との共同研究、早期導出なども視野に入れます。

※<sup>1</sup>インシリコ:in silico は「コンピュータ(シリコンチップ)の中で」の意味で、ここではコンピュータを用いた創薬アプローチのことを指します

※<sup>2</sup>in vivo(イン・ビボ) :in vivo は「生体内で」の意味で、ここでは動物実験などのことを指します

※<sup>3</sup>in vitro(イン・ビトロ) :in vitro は「試験管内で」の意味で、ここでは細胞実験などのことを指します

#### 【「Deep Quartet(ディープカルテット)」について】

AI 創薬プラットフォーム「Deep Quartet」は、インテージヘルスケアと株式会社理論創薬研究所、株式会社アフィニティサイエンスが 3 社連携で提供するサービスです。「Deep Quartet」は、深層強化学習の技術である(1)Deep reinforcement learning、ファーマコフォアモデルを用いるソフトウェア(2)LigandScout、網羅的なターゲット予測を可能とする機械学習ベースの技術(3)CzeekS を組み合わせた一連のフローであり、ここに (4)メディシナルケミスト(有機合成化学者)の知見を加えることで、Quartet(四重奏)による AI 創薬プラットフォームを実現しています。

技術の詳細や事例については、以下の論文を参照ください。

・Design and synthesis of DDR1 inhibitors with a desired pharmacophore using deep generative models. ChemMedChem 2021;16:955-58.

・Strategies for design of molecular structures with a desired pharmacophore using deep reinforcement learning. Chem Pharm Bull (Tokyo) 2020;68(3):227-33

#### 【株式会社インテージヘルスケア】 <https://www.intage-healthcare.co.jp/>

株式会社インテージヘルスケアは、ヘルスケア領域のマーケティングリサーチおよび医薬品開発・製造販売後調査・安全性業務支援をコアビジネスと位置付けています。インテージグループのヘルスケア領域を担う各社※と一体となり、ソリューションを提供。それにより、ヘルスケア領域のあらゆる課題に対して、「医療消費者」起点のデータの価値化による、最適な意思決定をサポートしていきます。

株式会社インテージヘルスケアは 2019 年 4 月、株式会社アスクレップと株式会社アンテリオが経営統合し、スタートしました。

※ 株式会社協和企画、株式会社インテージリアルワールド、株式会社プラメド、Plamed Korea Co., Ltd.

#### 【本件に関するお問い合わせ先】

株式会社インテージヘルスケア

事業開発本部 : 村上(むらかみ)

広報担当 : 川畑(かわばた)

TEL : 03-5294-8393(代)

お問い合わせ : [pr-ihc@intage.com](mailto:pr-ihc@intage.com)

お問い合わせフォーム : <https://www.intage-healthcare.co.jp/contact/service/>