

大手製薬企業との共同検証で化合物を実合成  
AI 創薬プラットフォームで高い成果  
独自プロジェクトで癌や免疫疾患領域の化合物をデザイン

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)と、株式会社理論創薬研究所(本社:神奈川県藤沢市、代表取締役社長:吉森篤史)、株式会社アフィニティサイエンス(本社:東京都品川区、代表取締役社長:田坂友彦)の三社は、共同で提供するAI創薬プラットフォーム「Deep-Quartet」(ディープカルテット)を用いて、国内大手製薬企業との共同検証を行ってきました。その結果、新規骨格で高い活性(IC<sub>50</sub>で数十 nM オーダー)<sup>(※1)</sup>を持つ化合物を得るなどの優れた成果を出しました。この製薬企業は、すでに本共同検証プロジェクトから技術移転を受け、社内での活用を進めています。

また、「Deep-Quartet」を提供する同三社は、さらなる技術開発を独自に進め、癌や免疫疾患領域をターゲットに、新規の化学構造デザイン<sup>(※2)</sup>から実合成・評価までを実施する2つの自主開発プロジェクトにおいて、すでに高活性化合物を得ています。これらの成果と知見は、今後、論文による発表のほか、インテージヘルスケアが開催するオンラインセミナー(10月8日、Webinar開催)において詳細を報告する予定です。

※1 IC<sub>50</sub>は50%阻害濃度。化合物の生化学的阻害作用の有効度を示す値。数十 nM(ナノモラー)はリード化合物に期待される活性の強さの指標となる濃度

※2 *de novo*デザイン

【担当者コメント】

「Deep-Quartet」の提供を開始してからおよそ1年間、多くのプロジェクトに活用いただき、成果を得られています。これまでのプロジェクトを通して改めて確認することができた重要なポイントは、AI技術とメドケム<sup>(※3)</sup>の知見をいかに融合させ、AIから提示される化学構造を対話的に選択できるかという点です。「Deep-Quartet」は、AIとメドケムのコミュニケーションプラットフォームの役割を果たし、化合物最適化や骨格変換において、研究開発を加速し、飛躍させることを確認しました。これらの成果は、創薬研究においてAIをどのように位置づけ、取り入れるべきかという観点においても重要な知見となったと考えています。

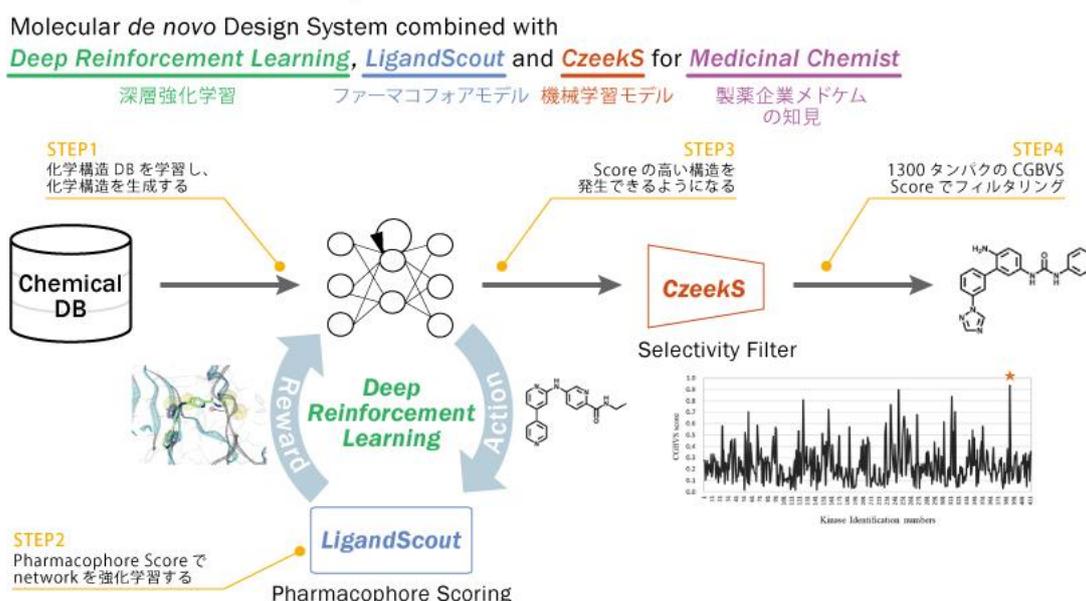
株式会社インテージヘルスケア 創薬支援室長 村上 竜太

※3 メドケム:メディシナルケミスト、創薬化学者のこと

【「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、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、ここに製薬企業各社の(4)メディシナルケミスト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するという意味を込めています。

<AI 創薬プラットフォーム「Deep-Quartet」概念図>



技術の一部は以下論文に掲載

Chemical and Pharmaceutical Bulletin (Chem. Pharm. Bull. 68, 227–233 (2020))



【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。

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。

インテージヘルスケアの創薬支援サービスは、2008 年に設立された京都大学発ベンチャーである株式会社京都コンステラ・テクノロジーで培われた 10 年以上の実績を継承しています。ビッグデータ・AI 創薬関連の独自技術を保有し、2019 年 4 月からはインテージヘルスケア・創薬支援室としてサービスを提供しています。

<https://www.insilico.jp> (創薬支援サービスのサイト)

※ 株式会社協和企画、株式会社医療情報総合研究所、株式会社プラメド、Plamed Korea Co., Ltd.



AffinityScience

【株式会社アフィニティサイエンス】 <https://www.affinity-science.com/>

アフィニティサイエンスは、研究支援ソフトウェアの輸入販売や受託研究サービスを中心に、研究者・開発者向けの各種サービスを提供しています。特に、事象や現象をモデル(定式)化し、コンピュータを用いて演算 処理を行い、得られたデータを解析、特性や作用機序を系統的に研究する学問「計算科学(Computational Science)」に注力し、事業を展開しています。



【株式会社理論創薬研究所】 <http://www.itmol.com/>

インシリコ創薬を専門とするベンチャー企業。コンピュータシミュレーション技術を用いた、新しい創薬理論に基づくソフトウェアの開発を通じて、医薬品リード化合物の研究開発を行います。

【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

創薬支援室 村上(むらかみ)

Mail: [murakami-r@intage.com](mailto:murakami-r@intage.com)

お問い合わせ: <https://www.insilico.jp/inquiry/>