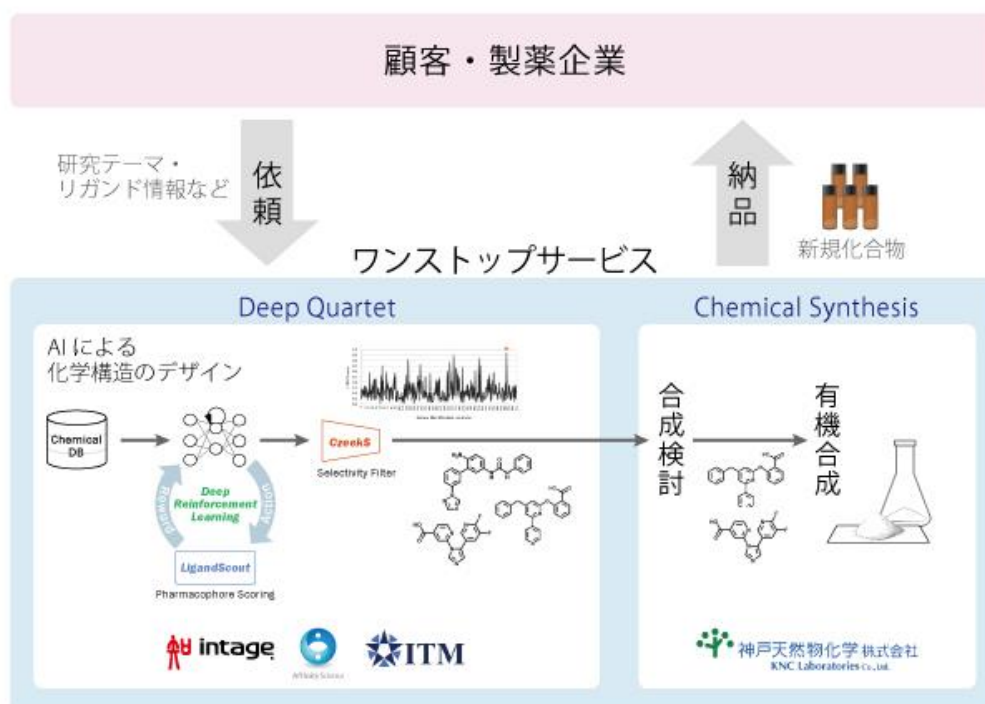


AI創薬によるドラッグデザインから実合成まで 創薬研究支援サービスをワンストップで提供開始

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、以下「インテージヘルスケア」と、神戸天然物化学株式会社(本社:神戸市中央区、代表取締役社長 宮内 仁志、以下「神戸天然物化学」)は、インテージヘルスケアが提供するAI創薬技術によりデザインされた新規化合物を、神戸天然物化学が実合成することにより、ワンストップでの創薬研究支援サービス(以下、「本サービス」)の提供を開始します。

本サービスでは、まず、インテージヘルスケアからのAI創薬プラットフォーム『Deep-Quartet』により、ディープラーニングなどのAI技術を用いて新薬の化学構造を提案し、神戸天然物化学がメディシナルケミストリーの視点で評価、実合成を行います。両社の連携により、製薬企業等の顧客に対してAIによる新規化合物デザインから実合成までの、切れ目のないサービス提供が可能となります。

両社は、本サービスの提供により、製薬企業等の化合物最適化のプロセスを加速し、開発リソースの効率的な活用を提案します。業務委受託契約のほか、成功報酬やマイルストーン契約などの形で、製薬企業や創薬ベンチャー、アカデミアプロジェクトなどに提供する予定です。



【インテージヘルスケアと神戸天然物化学について】

インテージヘルスケアは、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、以下「理論創薬研究所」)、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、以下「アフィニティサイエンス」)と連携し、AI創薬プラットフォーム『Deep-Quartet』(ディープカルテット)を提供し、昨年12月より武田薬品工業株式会社との共同プロジェクトを開始するなど、AI創薬事業を積極的に展開しています。

神戸天然物化学は、医薬品開発/研究用試薬の受託研究・合成についての豊富な実績とノウハウを持ち、アカデミアなどとの共同開発において化合物デザイン合成を担当。ライセンス導出などの実績を有しています。また、これまでもインテージヘルスケアと連携し、新規化合物の合成を行い共同で特許出願も行っています。

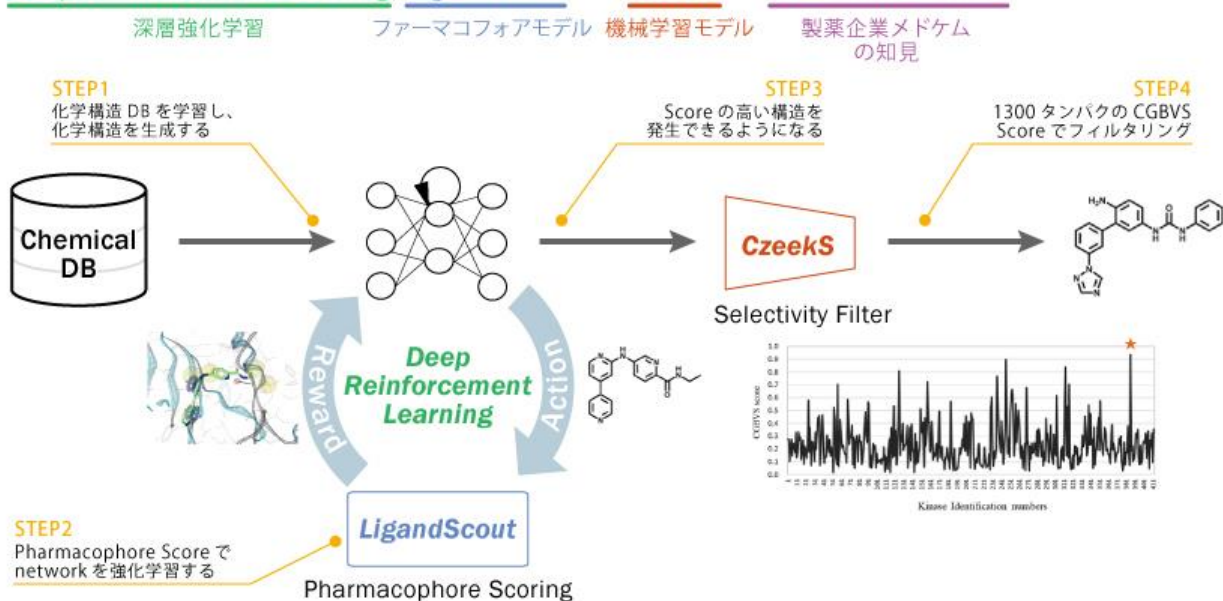
【AI創薬プラットフォーム『Deep-Quartet』(ディープカルテット) について】

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理論創薬研究所、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、ここに製薬企業各社の(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。

技術の詳細については、日本薬学会による学術雑誌 Chemical and Pharmaceutical Bulletin (Chem. Pharm. Bull. 68, 227–233 (2020))に論文が掲載されております。

<AI創薬プラットフォーム「Deep-Quartet」概念図>

Molecular de novo Design System combined with
Deep Reinforcement Learning, **LigandScout** and **CzeekS** for **Medicinal Chemist**



【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)京都コンステラ・テクノロジーズで培われた 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 月よりインテージヘルスケア・創薬支援部としてサービスを提供しています。

<http://www.insilico.jp> (創薬支援サービスサイト)

※ 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.

【本件に関する連絡先】

■株式会社インテージヘルスケア

創薬支援部 村上(むらかみ)

TEL:03-5294-8393(代)

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