

報道関係各位

ニュースリリース  
2022年8月26日  
株式会社インテージヘルスケア

## インテージヘルスケア、岡山大学 AI創薬による新薬開発の共同研究を開始 ～悪性腫瘍をはじめとする難治性疾患治療薬開発プロジェクト～

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）と国立大学法人岡山大学（本部：岡山市北区、学長：槇野博史）は、AI創薬による新薬開発の共同研究を開始しました。

### ■ 共同研究の概要

同大学の細野祥之教授（学術研究院医歯薬学域 薬理学）が行う Immunoglobulin(Ig) 様細胞外ドメインを標的にする難治性疾患治療薬の研究開発テーマにおいて、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）」による化合物のデザインを行い、新規化合物を得ることを目指します。

### ■ 共同研究の背景

研究開発のターゲットである Immunoglobulin(Ig)様細胞外ドメインを持つ受容体型チロシンキナーゼは、リガンド分子とのタンパク質間相互作用（PPIs）を介して、悪性腫瘍の発生と進展に無数の重要な働きを担っています。ところが、低分子化合物が結合できるポケットが少ないなどの理由により、その阻害剤の設計は困難を極めています。

インテージヘルスケアと岡山大学は、すでにインシリコスクリーニングによってシード化合物を見出しており、さまざまなモデルにおいてその効果を確認しています。これらの情報をもとに、AI 創薬によるアプローチでシード化合物の最適化を行います。本研究で得られる化合物は、悪性腫瘍をはじめとする難治性疾患治療薬として期待されます。

## 【「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<sup>※</sup>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。

<sup>※</sup> 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）

<https://www.intage-healthcare.co.jp/contact/service/>

[pr-ihc@intage.com](mailto:pr-ihc@intage.com)