

インテージヘルスケア、広島大学 AI創薬による「ペプチド擬態化合物」の 共同研究を開始

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）と国立大学法人広島大学（本部：広島県東広島市、学長：越智光夫）は、AI創薬による「ペプチド擬態化合物」の共同研究を開始しました。

広島大学大学院医系科学研究科は石灰化^{※1}研究に先進的に取り組んでおり、ペプチド医薬^{※2}の研究開発を進めています。今回の両者による共同研究は、「石灰化阻害因子の擬態化合物の創製」を研究開発テーマにおいて、ペプチド医薬を擬態する（同等の効果を持つ）新たな低分子薬^{※3}の開発を目指します。

ペプチド擬態化合物とは、ペプチド医薬と同等の効果を持つ低分子化合物のことで、経口投与が可能となり、高い製造コストを解決する手段として多くの機関で研究開発が行われています。

本件の共同研究では、インテージヘルスケアなどが提供する、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）」をはじめとする技術を駆使し、化合物（新薬の候補となるもの）を探索・デザインし、提供も行います。広島大学は提供される化合物の実験評価を行い、新規化合物を得ることを目指します。

この共同研究は「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：IAAP）」の一環として実施するものです。

※1：体内の軟部組織にカルシウム塩が沈着し、組織が硬化してしまうこと

※2：アミノ酸が複数つながっている「ペプチド」を主体とした医薬品。分子量としては数千になることから経口投与が難しいとされる

※3：分子量がおおよそ1000以下程度で経口投与が可能となる医薬品のこと

【「インテージヘルスケアAI創薬アカデミックプログラム」について】

AI創薬プラットフォーム「Deep Quartet」などAIによる計算アプローチにより新薬開発の化合物探索及び化合物デザインを行うとともに、インテージヘルスケアが化合物の提供までを行うことにより、アカデミアの持つ研究テーマにおいて医薬品候補化合物を見出す共同研究によるスタートアッププログラムです。

アカデミアの持つ研究テーマとモデルに対して、インテージヘルスケアらがAIによる化合物デザインを行い実際の化合物までを提供、アカデミアにてin vivo ないしは in vitroの評価実験を行い、新薬の候補化合物を見出そうとするものです。

このプログラムによりAI創薬による医薬品開発を促進し、加速させます。

【「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。

^{*} 株式会社協和企画、株式会社インテージリアルワールド、株式会社ブラメド、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>