

報道関係各位

ニュースリリース
2019年12月19日
株式会社インテージヘルスケア
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

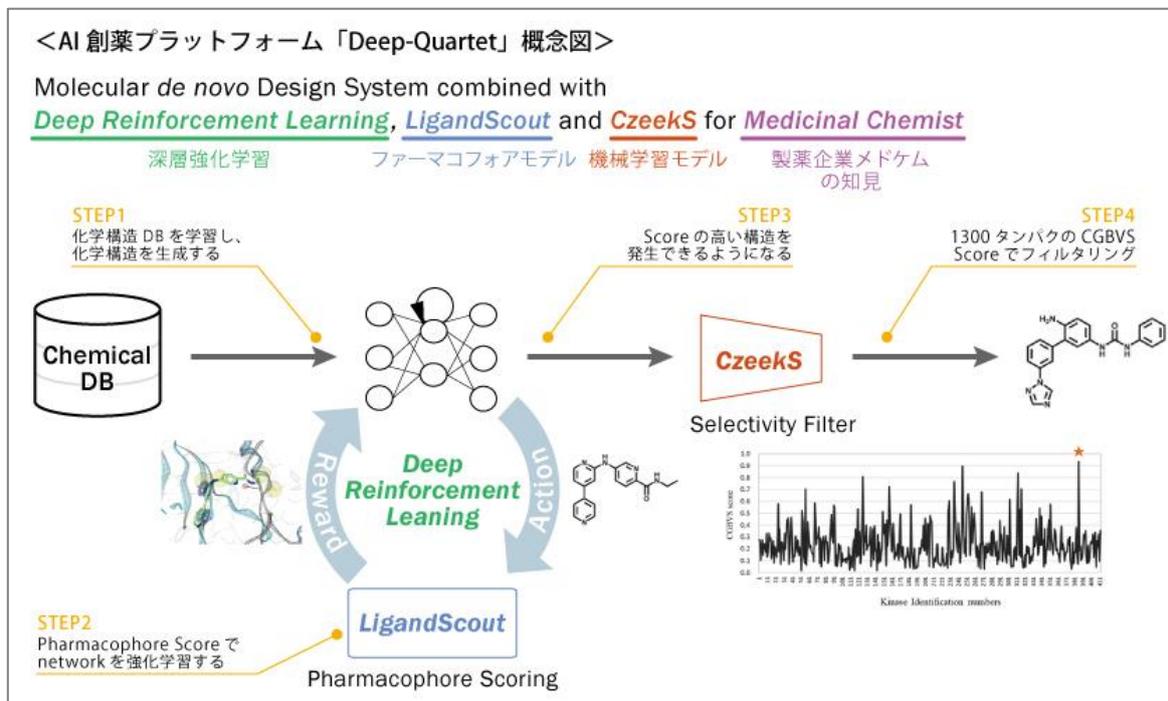
武田薬品工業とAI創薬プラットフォーム 「Deep-Quartet」の共同検証プロジェクトを開始 ～3社が共同して提案するAI創薬技術を3プロジェクトで実践投入～

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)、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」)は、3社が共同で提案するAI創薬プラットフォーム「Deep-Quartet」(ディープカルテット)を用いた、武田薬品工業株式会社との共同検証プロジェクトを開始します。

インテージヘルスケア、理論創薬研究所、アフィニティサイエンスの3社はこれまで、トータルに研究開発をサポートする創薬計算サービス「ACISS(エイシス)」や、インシリコ創薬戦略コンサルティングなどの創薬支援サービスを共同で展開してきました。2018年より、ディープラーニングなどのAI技術を用いた化合物の構造生成技術(*de novo*デザイン技術)を、既存のソフトウェアと連携させ、実践的な創薬AIプラットフォーム「Deep-Quartet」を提案。同技術の一部はすでに研究開発を経て関連学会での発表も行っており、論文公開(日本薬学会, Chemical and Pharmaceutical Bulletin)が予定されています。

【「Deep-Quartet」について】

2019年10月より本格サービスを開始した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(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する意味を含んでいます。



AI創薬プラットフォーム「Deep-Quartet」の技術開発にあたっては、次の3点を重視しています。

1. ディープラーニングなどのAI関連の技術開発のスピードは速く、最新の技術を継続して取り入れる仕組みと体制をつくること
2. 上記のAI関連技術と、既存で実績ある手法・ツールを積極的に組み合わせて活用すること
3. より実践的な創薬につなげるために、AIが出す結果はメディシナルケミスト(有機合成化学者)と議論できるものであること

「Deep-Quartet」では、最新のAI技術をブラックボックス化せず、細かなノウハウも含めて情報公開するオープンイノベーションにより進化させていくコンセプトのもと研究開発に取り組んでいます。学会発表や論文投稿はもちろんのこと、ユーザーである製薬企業には社内講習会などにより技術の詳細を共有し、同時にフィードバックを得ることで AI 創薬プラットフォーム「Deep-Quartet」を進化させていくスタンスをとっています。

また、Chemical DB や CzeekS には各社独自の社内データを用いることで、製薬会社の持つ知見を AI に取り込むことができるようになっている点も特徴となっています。

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

住 所: 東京都千代田区神田駿河台四丁目 6 番地 御茶ノ水ソラシティ 13 階

概 要: 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.



【株式会社理論創薬研究所】 <http://www.itmol.com/>

住 所: 神奈川県藤沢市村岡東二丁目 26 番地の 1

概 要: 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。



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

住 所: 東京都品川区西五反田 1-11-1 アイオス五反田駅前

概 要: 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。

【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/>