

平成 30 年 5 月 16 日

各位

インタープロテイン株式会社

人工知能 (AI) を用いた化合物の薬理活性値予測システムの 実用化ステージ移行に関するお知らせ

インタープロテイン株式会社 (代表取締役社長: 細田 雅人、本社: 大阪府大阪市北区) は、人工知能 (AI) を用いた化合物の薬理活性値予測システムの実用化ステージへの移行に関しまして、以下のとおりご報告いたします。

インタープロテインは、創薬標的の宝庫と目されつつも高難度の創薬対象と言われてきた蛋白質間相互作用 (PPI) に特化し、深層学習 (deep learning) に基づく薬理活性値予測システム (AI-guided INTENDD[®]) の開発に取り組んでまいりました。

その結果、標的 PPI と低分子化合物の活性を約 80% の確度で予測できる段階に達しました。具体的には、低分子化合物の活性を三桁 pM ~ 一桁 mM までの 8 クラスに区分し、標的 PPI に対する低分子化合物の活性がどのクラスに入るかを AI-guided INTENDD[®] で予測した後、実測値との比較を行い、テストした化合物の約 80% で予測クラスと実測クラスが一致するという検討結果が得られました。特に、活性が高い低分子化合物に限りますと、その確率は 90% 以上に達しました。

以上のように、AI-guided INTENDD[®] は PPI を標的とする低分子創薬の成功確度を飛躍的に高める技術として使用できることが示されました。

この技術により、これまでのように数千におよぶ合成展開とその活性評価を繰り返さずとも高活性化合物のみを合成、評価することが可能になると考えられます。これは、既存の化合物ライブラリーや合成研究者がデザインした未合成・未評価の化合物などの貴重な研究資産をより有効に活用することにもつながると共に、特許性のある化合物を多く含むバーチャル・ライブラリーも予測対象とすることなどにより、リード化合物最適化をより迅速に達成できるようになることを意味します。また、このようなアプローチは、PPI のみならず、酵素や (蛋白質をリガンドとしない) 受容体など、様々なタイプの創薬標的に対しても適応が可能です。

以上

インタープロテイン株式会社
取締役事業開発本部長 小松
TEL: 042-770-9477
E-mail: info@interprotein.com