

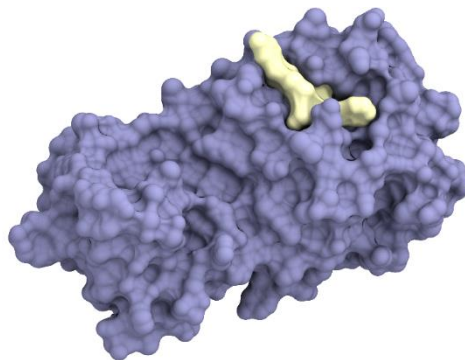
報道関係各位

京都薬科大学 新型コロナウイルス感染症治療薬のリード化合物を発見 株式会社 Preferred Networks との共同研究で 最新の AI 技術を取り入れた医薬品探索研究法を開発

京都薬科大学の赤路教授らの研究グループは、株式会社 Preferred Networks（本社：東京都千代田区、以下、PFN）との共同研究により、AI 技術を取り入れた医薬品探索研究法を開発するとともに、その技術を用いて新型コロナウイルス感染症 COVID-19 治療薬のリード化合物^{*1}を発見しました。

本成果は、新型コロナウイルス感染症の治療薬のみならず、あらゆる医薬品開発の加速化に寄与することが期待されます。

京都薬科大学では新興感染症の一種である重症呼吸器症候群（SARS: severe acute respiratory syndrome）治療薬開発を目指した基礎研究を継続して行ってきました。これまでに、SARS 原因ウイルスの増殖に必須の酵素機能を阻害できるペプチド型化合物や非ペプチド型環状化合物の創製に成功しています。この基礎研究を PFN が開発した深層学習技術に基づく AI 創薬技術と融合させることで、新型コロナウイルス（SARS-CoV-2）の増殖に必須の酵素（メインプロテアーゼ^{*2}）を阻害できる有望なリード化合物を創出しました。



新型コロナウイルスのメインプロテアーゼ（紫色）に結合して
増殖を阻害する薬剤（黄色）のイメージ

（知的財産保護のため、今回発見したものは別の物質を参考例として用いています）

創薬には一般的に基礎研究から製造・販売まで 10 年以上の時間と、数百億円以上の莫大な費用がかかるかとされています。さらに、その成功率はわずか 2 万分の 1 以下と言われており、開発期間の長期化と費用の増大が大きな課題となっています。AI 創薬とよばれる技術では、これまで研究者の知見に大きく依存してきた医薬品探索研究に深層学習技術と大規模な計算資源を投入します。これにより、候補物質の探索や分子設計などの医薬品開発工程を大幅に短縮するとともに、人間が発想できない新しい分子構造の提案ができると期待されています。

今回の PFN との共同研究では、これまでに京都薬科大学で蓄積してきた SARS コロナウイルス増殖阻害剤の基礎研究成果を AI 創薬手法と融合させることで、きわめて短期間のうちにこれまでにない新しい構造を持ったリード化合物を創製することに成功しました。これは、大学での基礎研究成果が

AI 創薬による化合物設計方針に高い実現可能性を与えるとともに、コンピューターが設計した化合物の薬としての合理性評価に極めて有効に働いた結果といえます。

実際には、PFN の AI 創薬技術とプライベートスーパーコンピュータ MN-2 によって提案された複数の化合物のうち、13 化合物を京都薬科大学で合成しそれらの活性評価を行った結果、7 化合物で新型コロナウイルスのメインプロテアーゼの活性を阻害する作用を確認しました。このような少数の厳選された候補化合物からきわめて短期間のうちに有望なリード化合物に到達することができたことは、有効な基礎研究の蓄積と最新の AI 創薬手法の融合が新たな医薬品開発手法に成り得ることを明確に示しています。

PFN との共同研究に関する詳細はブログをご覧ください。

<https://tech.preferred.jp/ja/blog/ai-drug-discovery-covid19>

京都薬科大学では今後もこのような最新の手法に貢献できる基礎研究を継続するとともに創薬基礎研究の実用化に向けた共同研究を加速させていきます。

***1：リード化合物**

本格的な創薬過程に進むのに十分な性質を有することが実験で示された化合物。リード化合物の特定は創薬の出発点で、その後に薬効や安全性を高める過程（最適化）に入ります。

***2：プロテアーゼ**

プロテアーゼはタンパク質を加水分解する酵素の総称で、新型コロナウイルスの増殖には 3CL プロテアーゼと呼ばれる独自のプロテアーゼが大きく関わることがわかっています。

■京都薬科大学について <https://www.kyoto-phu.ac.jp/>

京都薬科大学は、6 年制薬学部を有する単科大学であり、137 年の歴史を誇る日本で最も古い薬学教育研究機関の一つです。高度な専門能力と研究能力を有した薬剤師「ファーマシスト・サイエンティスト」を育成、これまでに輩出した 22,000 人を超える卒業生は、製薬企業、医療機関、学術界、行政機関などで活躍しています。2018 年には「社会を動かす薬学へ。」を新たなブランド・ビジョンに掲げ、薬学の枠を超えて広く社会に貢献できる人材の育成を進めています。

■株式会社 Preferred Networks について <https://www.preferred.jp/ja/>

深層学習技術とロボティクスなどの先端技術を実用化することを目的に、2014 年 3 月に創業。交通システム、製造業、バイオ・ヘルスケアの 3 つの重点事業領域をはじめ、パーソナルロボット、プラント最適化、材料探索、スポーツ解析、エンターテインメントなどの分野にも深層学習の応用領域を拡大しています。2015 年にオープンソースの深層学習フレームワーク Chainer™を開発。2020 年 6 月に続き、2021 年 6 月に自社開発の深層学習専用プロセッサ MN-Core™を搭載したスーパーコンピュータ MN-3 が Green500 リストで世界 1 位にランキング。

Chainer™、MN-Core™は、株式会社 Preferred Networks の日本国およびその他の国における商標または登録商標です。