

# 事後評価報告書

開発実施企業 : 株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ  
代表研究者 : 京都大学 大学院医学研究科 寄附講座 特定教授 奥野 恭史  
開発課題名 : 医薬品リード創製・最適化システム

## 1. 研究開発の目的

本新技術は、医薬品の候補化合物を自動で予測するドラッグデザイン計算法に関するものである。これまでも医薬品候補のドラッグデザイン計算に関する研究が取り組まれてきたが、精度や計算時間の問題から実用化が困難であった。本新技術では、人工知能技術を導入した独自のドラッグデザイン計算法を開発することにより、高速かつ高精度に医薬品候補化合物を自動で算出することが可能となる。本新技術の成功は医薬品開発を加速化し、さまざまな病気の治療につながるものと期待される。

## 2. 研究開発の概要

### ① 成果

本開発ではまず、フラグメンテーションアルゴリズムの開発と群知能最適化アルゴリズムの開発を行い、相互作用マシニング法と化合物ジェネレーターを融合して、医薬品リード創製・最適化システムを作製した。システムのパラメータの精密化を進めたところ、既存計算法をはるかに上回る計算速度を有することが検証された。この医薬品リード創製・最適化システムを用いて、創薬標的として有望な分子を対象に、化合物ライブラリーの設計を行った。次に、得られたライブラリーの化合物を実際に化学合成し、実証評価実験に供したところ、目標とする活性と同等の化合物が得られていることが明らかとなった。最後に、システムの動作確認と想定ユーザー企業からの要求仕様に基づき、最終仕様を策定し、パッケージ製品を完成するに至った。

### ② 今後の展開

従来手法に比べ、大規模な設備を必要とせず、簡便かつ高速のドラッグデザインシステムとして、各製薬企業に働きかけを行い、システムの販売や受託の事業化を目指す。

## 3. 総合所見

当初掲げた活性強度レベルの化合物がヒットし、既存計算法を凌駕する計算速度、およびシステムパッケージ製品を完成するとした開発目標水準を達成し、事業化可能なところに至っていると判断する。創薬標的として有望な分子を対象に、化合物ライブラリーの設計を行い、目標とする活性強度と同等の化合物が得られたことは大きな成果であり、創薬分野へのインパクトは大きい。

現在計画している製品イメージ、事業分野において、しかるべきパートナーとの協業をうまく進め、是非、普及・成功させるよう取り組んで欲しい。

以上