

2024年3月18日

各 位

会社名	株式会社エクサウィザーズ
代表者名	代表取締役社長 春田 真 (コード番号：4259 東証グロース)
問合せ先	コーポレート統括部長 前川 智明 (Tel: 03-6626-3602)

第一三共と実施する AI 創薬で成果

難易度の高い標的タンパク質に関するヒット化合物を短期で同定

当社は、第一三共株式会社（東京都中央区、代表取締役社長：奥澤 宏幸、以下、第一三共）と、共同で行っている、AI を活用した創薬プロジェクトで成果が出たことをお知らせします。病気の原因となる標的タンパク質の中でも難易度の高いターゲットに関して、良質なヒット化合物を取得することができました。両社は 2019 年からデータ駆動型創薬の実現に向けた共同開発プロジェクトを開始しており、2023 年からヒット化合物の創出プロジェクトを開始しております。

エクサウィザーズは AI を活用することで、創薬支援や医療機器プログラム並びに消費者や患者向けサービスの開発を行う事で、健康・医療分野における社会課題の解決を目指しています。

1. 今回の事業の成果について

【事業の成果】

エクサウィザーズは、AI 技術と構造ベース創薬（SBDD^{※1}）を組み合わせ、新たな創薬アプローチを構築し、その有用性を証明しました。本プロジェクトでは、約 60 億種類の化合物群から、潜在的なヒット化合物を効率的に見いだすための超大規模バーチャルスクリーニング^{※2}（Ultra-large virtual screening）を実施しました。

その結果、これまで良質なヒット化合物の取得が難しかった標的タンパク質に対して、バーチャルスクリーニングの開始からわずか約 2 カ月という短期間で約 400 の有望な化合物を絞り込み、選択することに成功しました。

また、選択した化合物の中からは、特定のタンパク質の反応（活性）を 50%抑制するために必要な濃度（IC50）が設定したクライテリアを下回る、ヒット化合物としての良好な活性を示す結果が得られました。

これらの化合物は、第一三共において研究が継続されています。

※1 SBDD: Structure-Based Drug Design

※2 多数の化合物からコンピューターなどを用いて良好な活性を示す化合物を絞り込む手法。従来は、数万から数百万の化合物を実験的に評価するハイスループットスクリーニングが活用されることが主流だった。

【エクサウィザーズと第一三共の強み】

本プロジェクトの成功は、エクサウィザーズの AI エンジニアと第一三共の研究者が持つ強みを結集し、それらが相互補完的に作用した結果として得られました。

エクサウィザーズのエンジニアが開発した AI 技術に加え、化合物とタンパク質の相互作用をシミュレートするドッキングシミュレーションを組み合わせたワークフローの構築、そして化合物の特性を詳細に記述するためのアノテーション設計・実装等に関する独自の知見や技術力が、第一三共の研究者が持つ製薬に対する深いドメイン知識と結びつきました。

2019年の協業開始以来、エクサウィザーズと第一三共が共に積み上げてきた知見と信頼を基に、AIやデータ活用の技術と製薬の専門知識を組み合わせることで、創薬の新たなアプローチを確立。化合物の探索をより迅速かつ効率的に行う手法を生み出しました。

2. 今後の方針について

今回の成果を踏まえ、両社は複数の標的タンパク質に対する共同研究を引き続き行い、さらなる成果事例を積み重ね、革新的医薬品の創出に向けて邁進します。

エクサウィザーズは、引き続きAI技術の開発と改良を行い、その技術を活用したデータ駆動型の創薬研究の推進を通じて、効率的な医薬品開発への貢献を目指します。両社の協力により、創薬の新たなアプローチを確立・強化し、化合物探索をより迅速かつ効率的に行う新手法を生み出すことで、医薬品研究の加速化に寄与してまいります。

3. 業績に与える影響

本件事業における成果が、当社の業績に与える影響は精査中ですが、中長期的に当社の業績向上に資するものと考えています。合理的な算定が可能となり、また業績に重要な影響を与えると判明した場合には、速やかに開示します。

(参考) 当期連結業績予想 (2023年8月14日公表分) 及び前期連結実績

(百万円)

	連結売上高	連結営業利益	EBITDA
当期連結業績予想 (2024年3月期)	8,500	△290	600
前期連結実績 (2023年3月期)	5,591	△378	72

以上