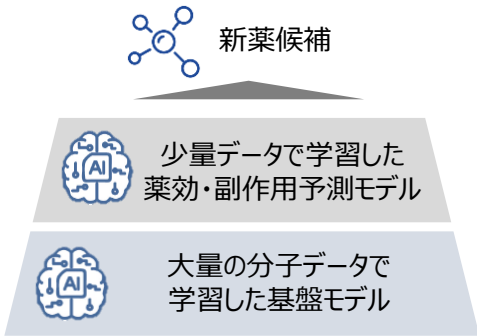


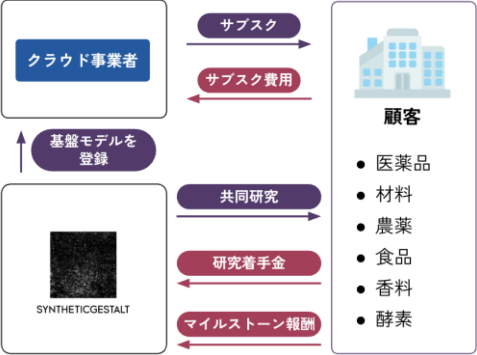
AI創薬を実現させる分子情報特化基盤モデル開発・事業成果概要

実施者	SyntheticGestalt株式会社
事業概要	創薬用途のAI開発に貢献するため、最大100億件の分子の立体構造を学習した基盤モデルを開発・評価し、AI創薬課題の標準ベンチマークで上位3位以内のランク入りを目指す



創薬用途のAI開発に貢献することを目指し、最大100億件の分子の立体構造を学習した基盤モデルを開発する。この基盤モデルによる低分子の薬効・副作用予測性能の向上を評価し、AI創薬課題の標準ベンチマーク全てに対して上位3位以内のランク入りを目指した。

社会実装イメージ



我々の基盤モデルは、創薬プロセスの様々な段階で活用可能であり、特にヒット化合物の探索やリード最適化の段階で大きな効果を発揮することが期待される。我々はクラウドベンダーと協力し、AI創薬を実現するための基盤モデルをクリアアプリケーションとして提供することで、国内外の製薬企業・その他新しい低分子の発見を必要とする顧客候補企業にアプローチしていく。

事業成果

基盤モデル開発

創薬ベンチマークでの性能について、TDCベンチマークで現在利用可能な21の課題に対して、4ベンチマークにおいて上位3位ランクインを達成した (with model version is v117)。今後さらなる最適化を行い、ベンチマークでの上位成績をマークすることを狙う。なお、評価設定並びにスコアは ChemFM (10.48550/arXiv.2410.21422) の方法を採用した。

🥇 1位1件
🥈 2位2件
🥉 3位1件

評価データ公開

<https://github.com/syntheticgestalt/spr-assay-fragment-screening-admet-data>

結合親和性評価として、4種の標的タンパク質に対する1905のフラグメント化合物を用いた表面プラズモン共鳴（SPR）試験を実施。また、ADMET評価として、50化合物の血液脳関門（BBB）透過性、ヒト肝ミクロソーム代謝安定性、3T3光毒性試験を行い、各データを取得。これらの評価はすべてEnamine社にて実施し、各実験ごとに設定した閾値に基づき、各試験結果を二値化した。