

ランチョンセミナーLS06

## Preferred NetworksにおけるAI創薬への取り組みのご紹介

画像やテキストの認識・生成において飛躍的な発展をもたらした深層学習は、生物学や化学、特に創薬分野においてもその活用が広がってきています。これらの分野では、ゲノム情報、タンパク質や核酸の配列情報・立体構造情報、ペプチド、低分子化合物など、多種多様なデータが対象となりえますが、それらを有効に活用し、大きな成果が出始めている分野もあります。本セミナーでは現在、Preferred Networksが注力している

- 1) 深層生成モデルによる低分子化合物の自動設計
- 2) Preferred Potentialのドラッグ様化合物における性能評価と応用
- 3) Preferred Networksにおける結合自由エネルギー計算パイプラインの開発

の3つのテーマに関する講演を行います。また、アカデミアや製薬企業との創薬に関する共同研究を含むPreferred NetworksにおけるAI創薬への取り組みを、最新の動向も含め、ご紹介させていただきますので、是非お立ち寄りください。

日時： 2023/10/25（水） 12:00 - 13:00

会場： 407

講演者： 石谷 隆一郎、山岸 純也、武本 瑞貴

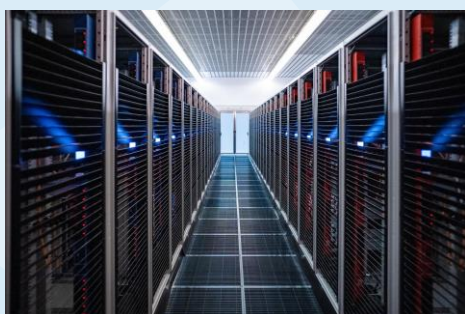
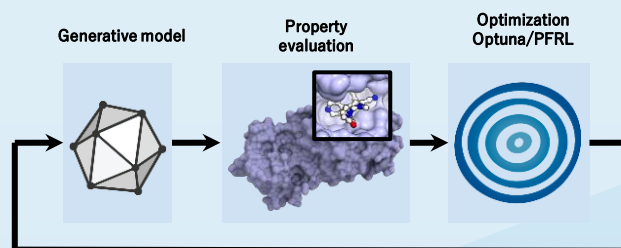
We are Hiring !!

私たちはプログラミングに強く、技術への情熱を持つ皆様を歓迎します



## AIによる創薬支援

莫大な時間・コストがかかる化学・生物実験の削減と創薬の効率化を目指し、深層生成モデルやシミュレーションを活用した分子設計を主軸としたAI創薬技術で創薬研究を支援しています。京都薬科大学様との共同研究では、新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) 治療薬の開発を目指し、数十万の化合物をAIにより自動設計しました。最終的に合成された12化合物の半数以上(7化合物)が阻害活性を有することを確認し、リード化合物の取得に成功しました。アカデミアや製薬企業との共同研究は随時進めており、上記以外のケースでも多数のリード化合物取得に至っています。

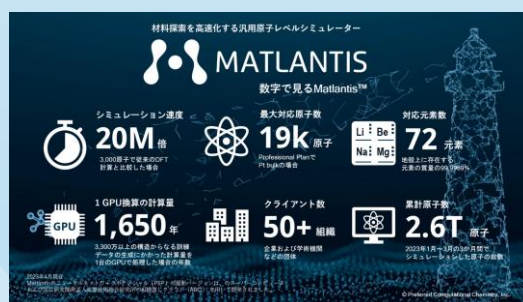


## 創薬に提供可能な自社スパコン

1,300台以上のGPUを有する大規模なスーパーコンピュータを自社運用しており、大量の計算資源が必要な計算創薬のワークフローも実行可能です。例えば、タンパク質・リガンド結合自由エネルギー計算のような高精度な計算を行うには多くの計算リソースが必要ですが、自社運用するスパコンを活用することで、多数の化合物やターゲットおよび計算条件を同時に計算することが可能となり、*in silico* 創薬プロセスの効率化が期待されます。また、データの保管に必要なストレージ等も社内でも保有しているため、外部のサービスにデータを送信・保管することなくすべての計算を完結させることができます。

## Matlantis™ (材料科学)

材料科学分野において、汎用原子レベルシミュレータMatlantis™を2021年7月より提供しています※。Matlantis™は、ニューラルネットワークポテンシャルPreferred Potentialを使用し、原子スケールのシミュレーションを量子化学計算(DFT)と比較して数十万から数千万倍程度高速に計算可能です。さらに72種類の元素をサポートし、未知の素材や結晶などに対してシミュレーションできる汎用性を有しています。クラウドサービスとして提供されているためハードウェアやソフトウェアのインストールが不要であること、JupyterLabによるプログラミングで柔軟なカスタマイズが可能であることが特徴となっています。



<https://matlantis.com/>

※現在、Matlantis™は材料分野への研究開発向けに(株)Preferred Computational Chemistryが販売とサポートを行っています。

## 会社概要

- ・ 現実世界を計算可能にする
- ・ 最先端の技術を最短で実用化する



### 基本情報

商号 株式会社Preferred Networks  
設立 2014年3月  
社員数 約300名

### 事業内容

深層学習やロボティクスなどの先端技術を応用したソフトウェア・ハードウェア・ネットワーク技術の研究・開発・販売

### 主要子会社

Preferred Networks America, Inc.  
株式会社Preferred Computational Chemistry  
株式会社Preferred Robotics

### 出資企業

トヨタ自動車株式会社/ファナック株式会社/日本電信電話株式会社/ENEOSホールディングス株式会社/中外製薬株式会社/株式会社博報堂DYホールディングス/株式会社日立製作所/三井物産株式会社/みずほ銀行株式会社/東京エレクトロン株式会社