AIと進化分子工学を統合したペプチド/抗体分子設計

- 共同創薬パイプライン事例 -

Google Cloud

株式会社MOLCURE　CEO 小川隆

MOLCURE Inc.

MOLCURE

MOLCURE-AI / DX の導入により、創薬プロジェクトの
成功率を高めるペプチド・抗体分子設計を実現。

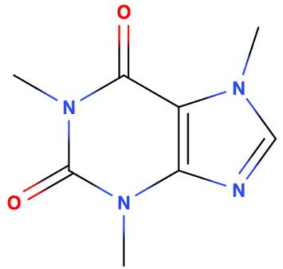
製薬企業向けの MOLCURE-AI / DX を 2018 年にローンチ。
7 社 10 プロジェクトの共同創薬研究契約を締結。

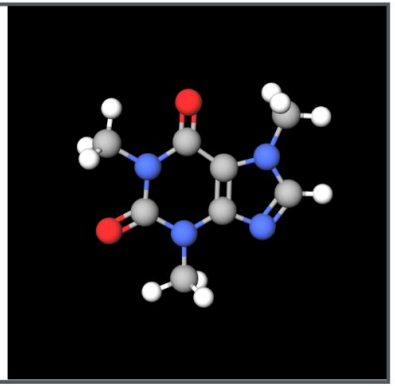
pM レベルの結合力を有する抗体を3 週間で設計。
多様な構造/配列の医薬品候補分子を多数設計。
世界で初めて、ある創薬標的に対して効果を持つペプチドを設計。

Google Cloud

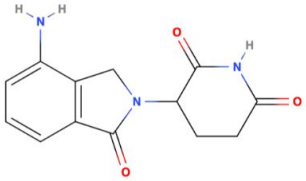
分子の構造（カフェイン、低分子医薬品）

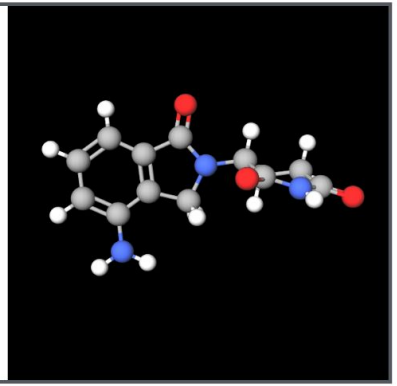
カフェイン





低分子抗癌剤：レナリドミド





分子の構造（近年のバイオ医薬品）

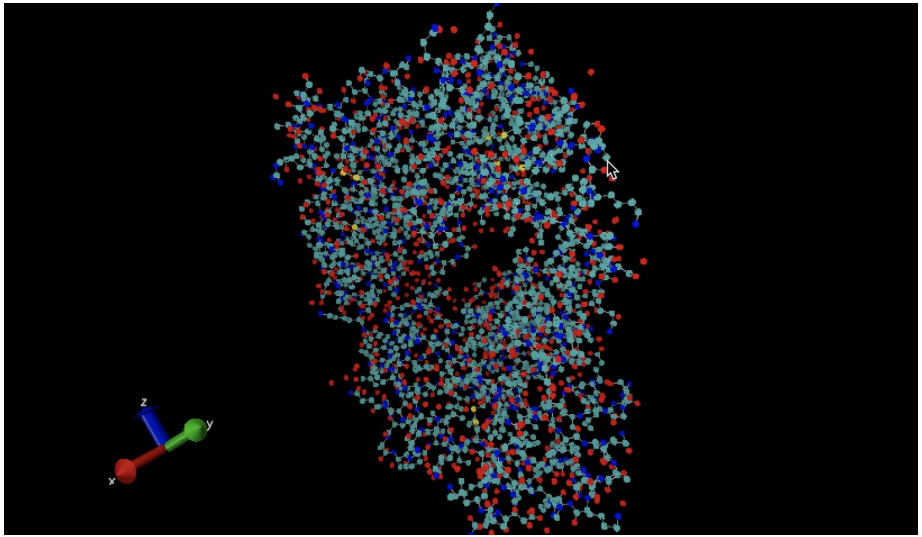
近年の医薬品(バイオ医薬品)は

巨大

かつ

複雑

抗癌剤（バイオ医薬品）：リツキサン



Google Cloud

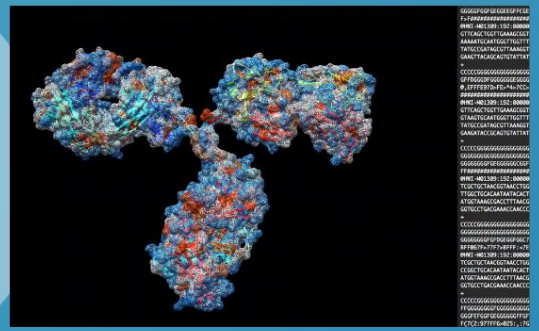
MOLCURE-AI: “BIO LAB DX LOOP”

異分野技術の融合とDX による、AI 学習環境の最適な設計。

自動実験ロボット

バイオテクノロジー実験

MOLCURE-AI



Google Cloud

MOLCURE-AI: “BIO LAB DX LOOP”

8 年間のループ反復により、世界最高性能の分子設計AI を実現。

DXによる、大規模な
実験データ回収

1兆種類以上の分子ライブラリ
(Peptide/antibody) を設計・製造

バイオテクノロジー
スクリーニング
phage display, mRNA display,
cDNA display

人工知能解析
deep learning, SVM, random forest,
MD simulation, regression, etc.

Google Cloud

MOLCURE-AI: “BIO LAB DX LOOP”

独自実験に基づいた圧倒的なサイズのデータの獲得に成功

MOLCURE

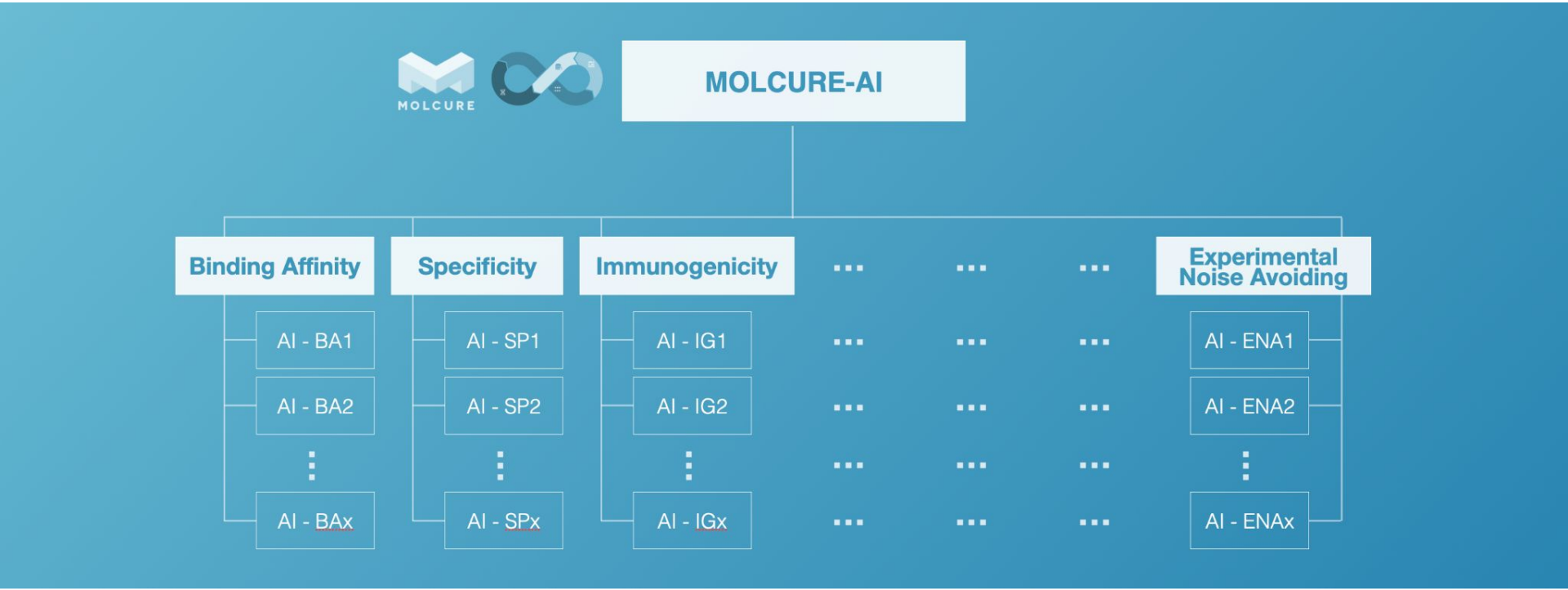
Over 1,000,000,000 entries

Antibody/peptide data from 8 years of wet lab experiments
NO virtual data included

Comparison with the largest public database

MOLCURE	>	1,000,000,000 entries	MOLCUREの独自データベース
CiteAb	<	5,500,000 entries	公共データベース
Biocompare	<	4,000,000 entries	公共データベース
IMGT	<	2,000,000 entries	公共データベース

AI を束ねたアンサンブル アーキテクチャ



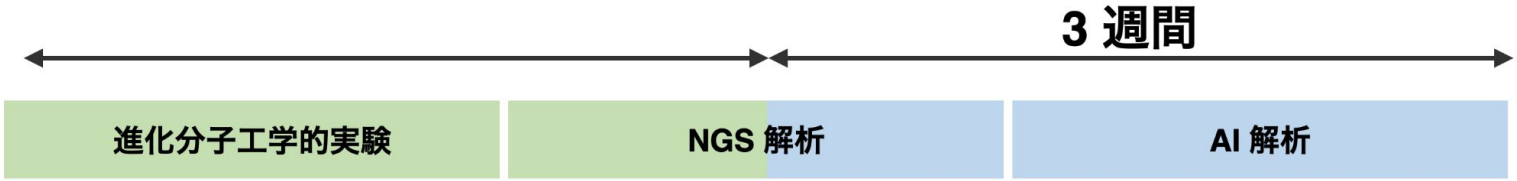
事例紹介：抗体医薬品の分子設計

3 週間で pM レベルの結合力を有する抗体を設計

創薬パートナー

（アメリカ製薬企業）

MOLCURE



事例紹介：抗体医薬品の分子設計

100 倍の結合力

を有する医薬品候補群の設計に成功

※ Affinity Maturation ではなく、
新規の抗体を設計しました。

強い結合力

Source	Clone	HCDR3	1.2 ml yield (ug)	ka (M-1 s-1)	kd (s-1)	KD (M)
MOLCURE AI	confidential		77.0	8.82E+05	1.00E-06	1.13E-12
MOLCURE AI			84.0	6.27E+05	1.00E-05	1.59E-11
Partner's EXPERIMENT			156.8	6.57E+04	1.00E-05	1.52E-10
MOLCURE AI			40.0	4.21E+05	3.00E-04	7.13E-10
MOLCURE AI			37.0	4.15E+05	3.03E-04	7.29E-10
MOLCURE AI			105.0	4.51E+05	4.02E-04	8.92E-10
MOLCURE AI			260.0	9.13E+04	9.16E-05	1.00E-09
MOLCURE AI			180.0	3.46E+05	6.04E-04	1.75E-09
MOLCURE AI			131.0	3.76E+04	1.29E-04	3.42E-09
MOLCURE AI			96.0	2.24E+05	8.60E-04	3.84E-09
MOLCURE AI			7.0	1.10E+05	6.43E-04	5.86E-09
Partner's EXPERIMENT			117.0	6.25E+04	4.13E-04	6.62E-09
Partner's EXPERIMENT			163.8	6.03E+04	1.54E-03	2.54E-08
Partner's EXPERIMENT			98.3	7.24E+04	2.01E-03	2.78E-08
Partner's EXPERIMENT			133.4	9.41E+04	2.69E-03	2.85E-08
Partner's EXPERIMENT			238.7	5.94E+04	1.81E-03	3.06E-08
Partner's EXPERIMENT			152.1	9.36E+04	3.62E-03	3.87E-08
Partner's EXPERIMENT			322.9	3.73E+04	3.07E-03	8.23E-08
Partner's EXPERIMENT			126.4	5.09E+04	4.35E-03	8.55E-08
Partner's EXPERIMENT			114.7	8.07E+04	1.03E-02	1.27E-07
Partner's EXPERIMENT			154.4	1.34E+05	2.02E-01	1.50E-06

★ pM
★ sub pM

弱い結合力

Google Cloud

製薬企業の創薬プログラムの成果を最大化

他の手法では探索困難な、優れた分子を設計

Candidates that can be only found with MOLCURE technology

0 → 1

多様な配列/構造の分子を設計

x10s

MOLCURE-AI / DXにより、パートナーの医薬品探索プログラムの成果を最大化

Google Cloud

ACCELERATE DRUG DISCOVERY

Thank you!

Google Cloud