



携手药物研发风投 为新药研发流程带来变革

近几年，为了应对尚未确立治疗方法的疾病，以及实现副作用较小的药物，新药研发的潮流正逐渐从低分子合成药物向中分子新药的研发转移。富士通与在中分子新药研发领域拥有独创技术的肽梦想(PeptiDream)合作，大大改善了候选化合物的探索过程。基于这一成果，富士通与肽梦想等公司设立了一家专门以开发新冠病毒治疗药物为目的的公司，并致力于加速新药研发整体流程的数字化转型。

合作伙伴概况

肽梦想株式会社是由东京大学发起，并于2006年成立的生物领域的风投企业。2013年在东证创业板上市，2015年在东证一部上市，市值总额稳居生物技术领域顶级水平。公司的成功建立在其独特的药物研发平台系统“PDPS(Peptide Discovery Platform System)”之上，该系统拥有实现高效合成和评估高度多样化的特殊环肽的技术能力。利用这一优势，肽梦想与日本国内大型制药公司，以及全球知名制药公司签订了许可协议，并致力于成为药物研发领域的全球领导者。



行业
医药



所在地
日本



设立
2006年 7月



Web
<https://www.peptidream.com/>



挑战

在多肽药物研发中，需要从数万亿个化合物库中快速挑选出候选化合物。并需要花费大量的时间和精力开展众多实验，最终完成药物的研发。除了通过利用 Digital Annealer 探索稳定的结构外，还有望通过利用先进 ICT 来提高活性/物理特性预测等，实现药物研发的高效化和数字化转型。

解决方案

- 利用 Digital Annealer 和 HPC，实现高速的候补化合物配位探索技术
- 利用 AI 技术实现药物研发探索中各项指标的高精度预测，如药理活性、药物代谢动力学、安全性、物理特性等
- 构建一个能够对研究数据、模拟技术及各研究人员所具备的知识进行融合和利用的平台，改进新药研发流程

展望未来

- 通过设立以肽梦想和富士通为中心的新公司(已于2020年11月设立)，为新冠病毒治疗药物的早期开发做出贡献
- 构建应对中分子药物研发的 IT 药物研发平台，实现药物研发过程的数字化转型

开发满足社会需求的新药 中分子药物研发备受期待

近年来，全球范围内对实现健康长寿社会的期望不断提升，但以新冠病毒（COVID-19）为代表的新型疾病所带来的威胁却日益严重。在这些社会问题背景下，制药行业正致力于新药的早期开发，以满足此前“未得到满足的医疗需求”，包括尚未确立治疗方法的疾病等医疗需求。

其中，分子量约为500至3,000的“中分子（肽）药物研发”正备受瞩目。该领域介于传统主流药物的“低分子药物研发”和充分利用生物技术的“抗体药物”之间。除了能够以较低成本开发和制造外，副作用风险亦较小，由于兼具这两大优点，因此人们对于安全有效的新药研发的期望正在提升。

肽梦想在分子药物研发领域拥有独特的技术，能够合成数万亿种特殊肽，并进行高速评估。公司正利用该技术致力于缩短研发周期，以便能够更快地创造出有效的新药。但是在低分子药物研发中已经得到普遍应用的模拟技术，却很难适用于中分子药物的研发。

其原因在于要计算的组合量不在一个数量级。例如，在由3个氨基酸组成的小分子情况下，其排列种类共有4,200种，并且利用普通计算机就可以计算，但如果它是由15个氨基酸组成的中分子，则将有16万亿种组合，这远远超出了传统计算机的计算能力。为了解决这一问题，富士通建议该公司使用“Digital Annealer”。

利用下一代计算技术 大幅提升候选化合物筛选效率

Digital Annealer在数字电路中实现了量子计算机的特性，克服了量子计算机目前面临的实际应用问题，其卓越的计算能力带来了很高的期望。它被评价为唯一能够在实际应用层面解决“组合优化问题”的计算机，而这些问题利用传统计算机很难解决。

富士通和肽梦想的联合研究始于2019年9月。为有效缩小候选化合物的范围，首先将环肽的分子排列按照其组成元素的氨基酸残基进行分组，实现“粗粒化”。然后利用 Digital Annealer 计算各氨基酸残基处于哪个位置才能形成稳定的结构。我们认为将范围缩小后的结果利用 HPC（高性能计算，High Performance Computing）进行分子动力学计算，能够在短时间内进行更详细的搜索。（参见图1）

图1) 候选化合物稳定结构探索流程





“我们希望通过融合富士通的先进ICT和我们公司积累的知识和专长, 为药物研发带来创新, 并尽快提供包括新冠病毒治疗药物在内的新药, 满足社会的需要。”

肽梦想株式会社, 董事副总裁, 舩屋 圭一

结果, 在大约12小时的短时间内, 就得到了非常高精度的结果, 与实际的实验结果误差仅为0.73埃[※]。除显著提高新药研发速度外, 还有望为新药研发开辟道路, 尤其是那些尽管有可能性, 但却因时间和成本方面的原因而不得不放弃的新药开发。

成立新公司开发新冠病毒治疗药物 合作实现药物研发的数字化转型

基于这些成就, 富士通、肽梦想与瑞穗资本、竹中工务店和岸田化学共5家公司于2020年11月合资成立了一家名为“PeptiAID Inc”的新公司。公司旨在进行新冠病毒治疗药物的早期开发, 以跨行业之力致力于解决这一全球性问题。即使疫苗接种到位后, 治疗药物还是必需的, 因此希望使用Digital Annealer和HPC技术尽快开发出药物。

随着该公司的成立, 富士通和肽梦想的伙伴关系进一步加强。除了探索稳定的结构外, 双方还在共同致力于构建药物研发IT平台, 其中包括基于AI的活性和物理特性预测, 以及研究人员的知识共享和研究数据的灵活利用。

我们的目标是通过将中分子药物研发领域龙头企业肽梦想所拥有的专业知识和专长, 与富士通的各种先进ICT相融合, 打造全球制药公司所需的数字化药物研发服务。而我们的愿景是通过提供有效的全球服务, 来保护和改善全世界人民的健康。

※ 1 埃 = 0.1 纳米