



2026年4月27日

各位

会社名 株式会社 Veritas In Silico
代表者名 代表取締役社長 中村 慎吾
(コード番号: 130A 東証グロース市場)
問合せ先 執行役員 経営企画部長
郷田 恒雄
Email: ir@veritasinsilico.com

当社の AI 創薬を支える、 スクリーニング効率化手法 AISLAR の論文掲載のお知らせ

当社では、mRNA を標的とする低分子医薬品及び核酸医薬品の創薬研究を目的として、特化型 AI と実験技術を組み合わせた aibVIS を活用したビジネスに取り組んでおります。このたび、当社の CSO と研究員が共同で執筆した、特化型 AI を用いたスクリーニングの効率化手法についての学術論文が、ドイツの科学誌 Small Science に掲載されることとなりましたので、以下お知らせいたします。

今回、論文発表した手法は、特定の RNA 構造に対する低分子創薬に必要な初期スクリーニングの効率を数倍に高めるほか、構造活性相関 (SAR) *1 を適用可能な RNA 結合化合物を効率的に取得することも可能にします。標的の豊富さという利点を有する mRNA 標的創薬において、本手法の活用は、その創薬上の難易度を、従来のタンパク質を標的とする創薬と同程度まで引き下げる効果もあります。

● 今回発表した論文の要約

RNA を標的とする低分子化合物は、強力な治療法になりうるとして注目を集めていますが、RNA に対する SAR の解明は依然として大きな課題となっています。当社の開発した機械学習 (AI) を活用した戦略「AISLAR (AI-augmented iterative screening of libraries against RNA targets)」は、SAR 解析が可能な RNA 結合化合物の創出を加速し、合理的な誘導体設計を可能にするものです。

この研究では、2つの RNA モチーフに対して多様なドラッグライクな化合物ライブラリを用いたスクリーニングを行い、AISLAR を適用することで、SAR を用いた化合物開発に適したケモタイプを得ることに成功しました。得られた代表的な化合物が 1つの RNA モチーフに直接結合することも、生物物理学的アッセイにより確認できました。そして、初期の SAR 傾向に基づいて仮説を構築することで、結合性を維持しつつ、予測される副作用の低減が期待される誘導体の設計が可能となりました。さらに RNA モチーフの結晶構造を用いたドッキングシミュ

レーションにより、検証済みのヒット化合物の妥当な結合様式を明らかにすることができました。すなわちこれらの結果は、さらなる検証が必要ではありますが、AISLAR が RNA を標的とした低分子スクリーニングと合理的な誘導体設計を結びつけるワークフローとして活用できることを示しています。



aibVIS に実装された当社独自開発の「特化型データ駆動 AI」AISLAR による機械学習を用いたスクリーニングフロー

● 弊社 CSO 森下 えら コメント

当社では創業以来、ルールベース AI を活用して、これまで創薬が困難とされてきた疾患に対して治療の道を拓くべく、mRNA を標的とした低分子医薬品の創薬研究に取り組んできました。社内研究の深化や共同創薬研究などの進展に伴い、世界でも類を見ない実験データが社内数多く蓄積されてきたことから、現在では、それらの実験データを活用する「データ駆動型 AI」の開発にも着手しています。今回の論文で取り上げた AISLAR は、そのような貴重なデータと AI を組み合わせることにより、新たなスクリーニング手法の開発につなげたものです。

この研究は、長期間にわたる取り組みであり、実験、データ取得、モデリング、解析など、さまざまな側面でのチームの貢献によって実現しました。コロナ禍の困難な状況の中でも研究を前進させ、成果に結びつけてくださった研究関係者の皆様、また著者以外にも、この研究にフィードバックや助言をお寄せくださった皆様に、この場を借りて御礼申し上げます。

個人的には、20 年ぶりに私の先輩である、上智大学 理工学部 物質生命理工学科の近藤次郎先生との共著にできたことも大変感慨深く思います。この論文を通じて、より多くの方々に mRNA を標的とした低分子創薬の可能性を感じていただき、当社とともにさまざまな医薬品の創出に挑戦していただければ幸いです。

(ご参考) 用語解説

*1 構造活性相関 (SAR) : SAR は Structure-Activity Relationship の略です。化合物の化学構造と、それが示す活性との関係性を指します。分子構造の変化が活性、選択性、毒性などにどのように影響するかを系統的に解析することにより、より有効で安全な薬剤の設計や最適化、作用機序の解明に不可欠な概念です。

[お問合せ先]の

● Veritas In Silico ウェブサイト お問い合わせフォーム : <https://www.veritasinsilico.com/contact/>