

～パターン認識アルゴリズムに基づく高精度な創薬シード・リード化合物探索手法のシステム開発～

委託先：(株)京都コンステラ・テクノロジーズ

研究代表者：代表取締役 村上 竜太

研究期間：平成20年10月～平成22年9月

主な研究実施場所：京都府京都市

研究成果：医薬品開発には、膨大な時間と費用を要する。特に、膨大な種類の化合物ライブラリーからヒット化合物を見つけ出す工程は、医薬品開発の効率化のボトルネックになっている。

上記の工程を加速化する最も有力な方法として、計算機の中で化合物スクリーニングを行うインシリコスクリーニングが実践されている。

当社は、この工程を加速化する有力な方法である、インシリコスクリーニングの独自方法論（相互作用マシンラーニング法）の開発を行い、実用化に成功している。

この計算手法は、従来のインシリコスクリーニング技術であるドッキング計算とは異なり、立体構造情報を用いずに、ケミカルゲノミクス情報（タンパク質－化合物の網羅的相互作用情報）のパターン認識に基づく機械学習アルゴリズム（サポートベクターマシン）を用いて化合物予測を行う世界に類を見ない方法論であり、共同研

究先である京都大学薬学研究科奥野研究室において、GPCRファミリーについてその予測率と新規骨格発見能力の高さが証明されている。

これらの新規手法の普及の為、GPCRファミリー以外の主要創薬ターゲットであるイオンチャンネル・キナーゼファミリーへの手法適応の研究開発を行い、計算のコアシステムを開発することで、製薬企業・関連研究所に向けたシステム販売・開発事業を展開することが可能となる。

研究成果説明図：

GPCR、イオンチャンネル、キナーゼ等の主要創薬ターゲットに適応可能な学習モデルを搭載した基盤システムの開発（下図）に成功している。

