

Matched Molecular Pairs Analysis によるデータの知識化 活用事例紹介と今後の展開について

服部 一成

塩野義製薬株式会社 創薬・探索研究所 創薬化学部門

Matched Molecular Pairs Analysis (MMPA) と呼ばれる解析手法が、大規模データからの知識抽出を行うデータマイニング手法として近年注目を集めている。その背景の1つには、創薬の現場において、個々の創薬プログラムから日々報告されデータベースに蓄積される活性・物性データをプログラム横断的に利活用し、プログラムの課題解決を促進させたいという狙いがある。本発表では、MMPA の適用事例として、ADMET の改善を課題として持つメディシナルケミストに対して、その改善につながりうる構造変換アイデアを提供することを目的として構築した置換基変換提案システムの概要およびその発想に至った経緯などを紹介するとともに、最近の論文からの事例や創薬において有用と思われる MMPA の適用範囲について演者の考え等も合わせて紹介したい。