

Multi-ADMET 最適化を目指した Matched Molecular Pair 探索による知の発掘；アステラス製薬における取り組み

石原 司, 森 健一, 森友 紋子, 宗像 亮介, 白井 宏樹, 新美 達也,
折田 正弥, 渡辺 俊博

アステラス製薬

創薬研究において、社内データベース或いは公共データベースに蓄積される化合物の活性・物性・毒性に関する情報は近年飛躍的に増加し、その情報活用は今や創薬研究における生命線と化している。化学構造の一部の構造のみを異とした化合物対である Matched Molecular Pairs (MMP) 解析の方法論は、構造変換に関する有益な知恵の創出を導きうるため、創薬研究における強力なデータマイニング手法として脚光を浴びている。

一方、近年の創薬研究においては、物理化学的・薬物動態学的・毒性学的性状などの多面的最適化が渴望されている。そこで我々は、この多面的最適化実現に向けて ADMET データに対する MMP 解析に着目し、MMP 解析および統計解析を自動実施する独自システムを構築した。本システムを用いることで、様々な構造変換が ADMET データに及ぼす影響を簡便な操作で俯瞰することが出来る。

本発表では、最近の MMP 解析に関する動向ならびに本システムの概要を報告する。