

未知化合物の活性プロファイリングと構造設計

高橋 由雅

豊橋技術科学大学 情報・知能工学系

創薬研究におけるコンピュータ援用技術の開発の観点から、未知化合物の活性予測問題ならびに新薬候補構造の設計問題は極めて重要かつ大きな関心事である。本講演では独自の構造プロファイリング手法と機械学習の技法を用いた活性予測問題へのアプローチを、様々な薬理活性クラスに対する分類器の開発と、未知化合物の活性プロファイリングへの応用の可能性などを大規模なデータを背景にした計算機実験の結果とともに紹介する。また、進化計算技法に基づく構造改変アルゴリズムをもとに、簡単なシード(種)構造から出発し、特定の活性の選択的な発現が期待される化合物の候補構造群を設計・提示するための方法として、分子進化計算の技法を具体的な応用例とともに示し、その有用性を議論する。