

研究開発課題概要

【研究開発課題名】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

民間基盤技術研究促進制度平成 20 年度新規提案

受託者	株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ
研究開発期間	平成 20 年 10 月～平成 22 年 9 月(2 年)
研究代表者名	奥野 恭史
研究開発の概要	<p>以下の構成で計画している。</p> <p>創薬シード・リード化合物探索システム(相互作用マシンラーニングモジュール)のパッケージ化</p> <ul style="list-style-type: none"> ・京都大学の特許技術を基本にした予測プログラムは、それぞれの計算ステップが断片化されているため専門研究者のマニュアル操作によって実行している。これらステップごとに断片化したプログラムをパッケージとして1本化する。 ・外部ソフトとの連携のための連結モジュールの付加による統合システムの開発 ・当社の主要技術である相互作用マシンラーニング法は、既存手法(ドッキングシミュレーション法等)と組み合わせることで、より高い予測精度を期待できる。本開発システムでは、これらの高い予測精度を示す複数の方法を組み合わせることにより、さらなる予測性能の向上を図る。 ・精度向上方策を確立した上で、既存手法の予測ソフト(無償、市販製品)との組み合わせ予測を実現する連結モジュールを開発する。

