

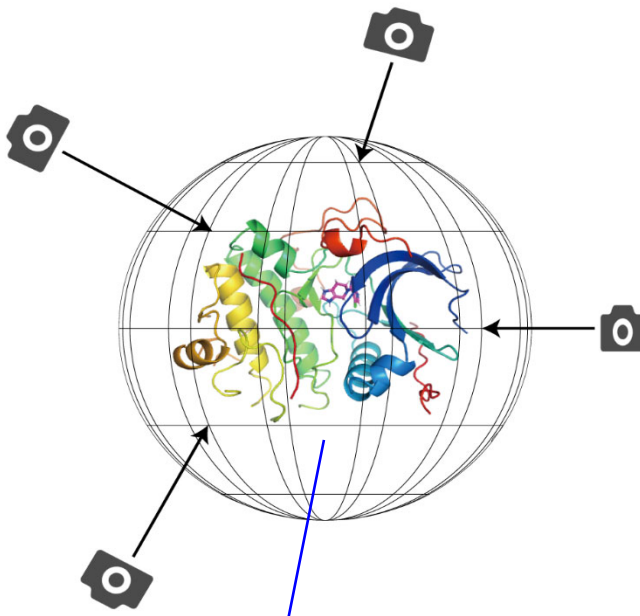
タンパク質-リガンド結合のディープラーニングによる予測 (Protein-ligand binding prediction by deep learning)

新技術の概要

タンパク質-リガンド構造を360° 網羅的に撮影し、ディープラーニングを用いる立体構造判定装置及び方法

タンパク質とリガンドの結合構造を、**360度周囲から撮影し画像生成**し、**ディープラーニングで学習**することで、従来メディシナルケミストが行ってきた「リガンドが標的タンパク質に結合するか」のvisual inspection をAIで代替し、判別する

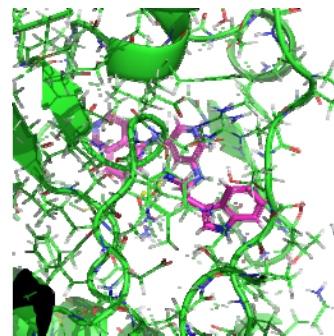
【画像生成】



この構造はドッキング
シュミレーションにより作成

【学習: 50層ResNetを使用】

学習する画像



本技術のアピールポイント

- ・ 経験豊富な医薬品の分子設計専門家のvisual inspectionをAIが代替
- ・ タンパク質-リガンド結合の立体構造の判定精度の向上

用途分野

- ・ 医薬品の開発ツール

特許情報

発明の名称 立体構造判定装置、立体構造判定方法、立体構造の判別器学習装置、立体構造の判別器学習方法及びプログラム

発明者 関嶋 政和 他

出願人 国立大学法人東京工業大学

出願 特願2019-015086 (出願日:2019/01/31)

公開 未公開

本学整理番号 18T119

