

# AIを利用した標的タンパク質に応じた新規化合物生成方法

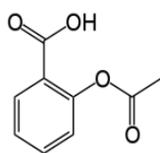
(AI-based New compound generation method suitable for target protein)

## 新技術の概要

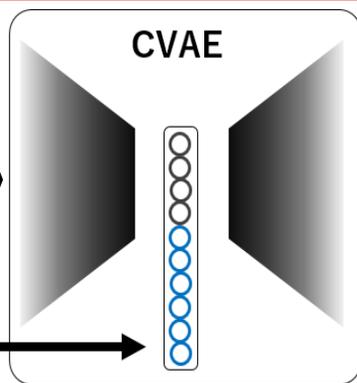
標的とする蛋白質に応じて、新薬となる可能性を持つ新規化合物をコンピュータ上で生成する方法を提供

標的タンパク質の**アミノ酸配列情報のみ**から、深層学習を用いて、**多様性に富んだ新規化合物を生成**することで、創薬の可能性を向上させる

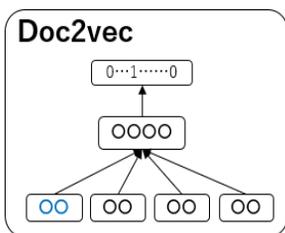
化合物データ:DBとの整合が良いSMILES記法を用いる



深層学習:条件付き自己符号化器を用い、化合物、タンパク質の原子、アミノ酸間の接続が特徴づけられるように、隠れ層に時系列を考慮した再帰型ニューラル・ネットワークを用いる。

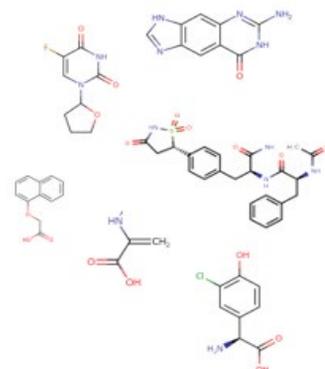


... PSWVKTL...



タンパク質の入力データ:自然言語処理の技術を展開。アミノ酸配列を3文字ずつ区切る処理(3-gram)により予測精度最適化。

## 化合物生成



## 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発想をAIが支援
- ・ ランダムスクリーニング無しに探索化合物の多様性を拡大

## 用途分野

- ・ 医薬品の開発ツール

## 特許情報

発明の名称 化合物生成装置、化合物生成方法、学習装置、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2020-063193 (出願日:2020/03/31)  
(米国仮出願番号:62/923,632 (出願日:2019/10/21))  
公開 特開2021-68410 (公開日:2021/4/30)  
本学整理番号 19T121

