

立体構造データベース(3DMET)での討論、ChemAxonにおけるAI適用について、 生物/化学的等価性でのリガンドや蛋白デザインへのAI適用

3D structure database (3DMET), Application of AI technology of ChemAxon, Application of AI to ligand and protein design with bio/chemical equivalence

開催趣旨:

計算毒性学は多種多様な研究分野や技術から構成される典型的な複合研究となる。

本フォーカストセッションでは計算毒性学関連技術として、最初に三次元化合物データベースについてのご講演をいただく。また、ChemAxonでのAI適用に関する最新のアプローチを紹介いただく。また、生物及び化学的等価性の概念はリガンドや蛋白デザインでの基本概念となるが、最新の研究となるAI技術を適用しての生物/化学特性への適用について、Dr. Jordi Mestres先生にご講演頂く。それぞれ、時代の先端を行く最新の研究/開発事例であり、計算毒性学分野との連携や実践の参考とされたい。

モデレーター: 湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta, 株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

前田 美紀 Miki Maeda

農業・食品産業技術総合研究機構 National Agriculture and Food Research Organization

古田 一匡 Kazumasa Furuta, 富士通株式会社 Fujitsu Ltd.

狩野 敦 Atsushi Kanou, 株式会社 モルシス MOLISIS Inc.

1. 「天然化合物のデータベース: 計算化学的に正しい立体構造とは？」

前田 美紀 Miki Maeda

農業・食品産業技術総合研究機構 National Agriculture and Food Research Organization

良質なデータセットは、AI利用を始め種々の解析・技術を成功させるキーポイントである。演者らは「計算化学的に正しい」天然物のデータセットを得ることを目的として、マニュアルキュレーションによる天然化合物の立体構造データベースを構築してきた。データベース構築の過程で見えてきた各種課題をもとに、計算化学的に正しい構造とは何かについて議論したい。

2. 「ChemAxon 製品機能の化学構造式による AI 学習への適用」

古田 一匡 Kazumasa Furuta

富士通株式会社 Fujitsu Ltd.

昨今、話題となっているインフォマティクスの、富士通の取り組みのご紹介として、化学構造式を使ったAI学習をテーマに、弊部取扱製品 ChemAxon の機能を利用して、AI用化学構造式学習データの前処理に関する活用方法を紹介する。

3. A STRUCTURE-BASED MACHINE-LEARNING APPROACH TO DESIGN LIGANDS FOR NEW EMERGING AND DIFFICULT TARGETS

Dr. Jordi Mestres FRSC, CEO, Chemotargets SL, Barcelona.

jordi.mestres@chemotargets.com

A new structure-based machine-learning approach to drug design will be introduced. The approach is based on the concept of chemoisosterism of protein environments developed in our group [1]. In the same way that two chemical fragments are considered bioisosteric if they can bind to the same protein environment, two protein environments will be considered chemoisosteric if they can interact with the same chemical fragment. The increasing amount of crystal structures available for protein-ligand complexes allows for the application for machine learning techniques to identify chemoisosteric relationships among protein environments is. It is shown that one can recover the right location and orientation of chemical fragments constituting the native ligand in a nuclear receptor structure by using only chemoisosteric environments present in enzyme structures. Examples will be provided of the potential applicability of the approach on both emerging new targets, including old targets with new mechanisms of action (e.g., allosteric modulation), and difficult targets, such as protein-protein interactions. [1] X. Jalencas, J. Mestres. Chemoisosterism in the proteome. J. Chem. Inf. Model. 2013, 53, 279-292.