

三井情報、標的タンパク質の結合部位を予測する「DeepSeeker」に新機能追加
- タンパク質の構造データを学習・検証し、創薬プロセスの迅速化を支援 -

三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:浅野 謙吾、以下 三井情報)は、創薬において「病気の原因となるタンパク質(以下 標的タンパク質)」が低分子医薬品と結合する位置を予測するソフトウェア「DeepSeeker(ディープシーカー)」に新たな機能を追加し、2022年4月1日より提供を開始します。今回の機能追加では企業や研究所が独自に、タンパク質の構造データをDeepSeekerに学習させ、予測したいタンパク質に合った独自の学習モデルを作成できるようになりました。三井情報はDeepSeekerの提供を通じて、創薬プロセスの効率化を後押しし、低分子医薬品開発を支援していきます。

低分子化合物を有効成分とする低分子医薬品は、標的タンパク質に対してその医薬品が結合することで効果を発揮します。そのため、低分子医薬における創薬プロセスでは、標的タンパク質にある医薬品が結合し得る部位を特定し、その部位に結合できそうな化合物(ヒット化合物)を見つける探索プロセスがあります。ヒット化合物になり得る候補化合物は数千万種類以上あり、それらを手作業で評価していくには大変な労力が必要です。かかる状況を受け、三井情報は画像認識技術を利用してタンパク質の構造データを学習させたAIの活用で、医薬品が結合し得る部位を予測するDeepSeekerの提供を2021年4月に開始しました。従前のバージョンは予測機能のみでしたが、独自の学習モデルを作成したいとユーザーから要望を受け、学習機能を追加しました。これによって、ユーザー自身が予測したいタンパク質に合った独自の学習モデルを作成できるようになり、創薬プロセスの迅速化が期待できます。

■追加機能

① タンパク質の構造データの学習

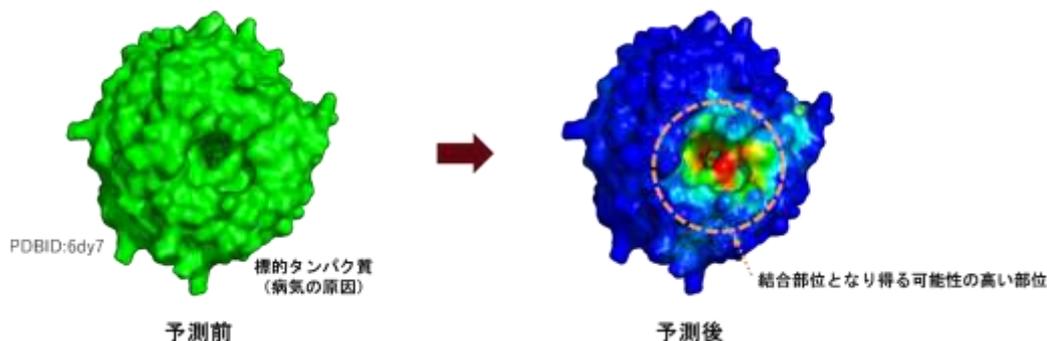
タンパク質の構造データをAIに学習させ、独自の学習モデルを作成できます。これにより、標的タンパク質の結合部位の予測精度が向上します。

② 学習モデルの検証

タンパク質の構造データを学習させた後、標的タンパク質の結合部位が正しく予測されるか検証できます。検証では結合部位が既知のタンパク質のデータを用いて学習モデルの精度を確認します。

③ データの作成機能

AIに学習させるための入力データへ変換する機能を搭載。PDB形式のデータに対応し、公共データベースにある多くのタンパク質構造データが学習可能になりました。



- 標的タンパク質にある結合部位の予測イメージ -

三井情報は1970年代よりバイオサイエンス事業に携わっており、製薬企業・アカデミアとの共同研究等を通して創薬およびヘルスケア分野におけるIT技術の活用に力を入れてきました。これまで培ったナレッジをもとに開発した「DeepSeeker」の提供を通じて三井情報は日本における創薬の進展に貢献していくことを目指します。

【関連ページ】

DeepSeeker: <https://www.mki.co.jp/solution/bio.html?tab=3>

MKI-DryLab for Microsoft Azure: <https://www.mki.co.jp/solution/drylab.html>

【三井情報株式会社について】

三井情報株式会社（MKI）はキャッチコピー『ナレッジでつなぐ、未来をつくる』を掲げ、ICT を基軸とした事業戦略パートナーとしてお客様の IT 戦略を共に創り、デジタルトランスフォーメーションを支援しています。半世紀にわたり培った技術や知見の結実である“KNOWLEDGE”を活かし、お客様と共に価値を創造する「価値創造企業」として絶え間ない挑戦を続けていきます。

ホームページ: <https://www.mki.co.jp/>

※三井情報、MKI 及びロゴは三井情報株式会社の商標または登録商標です。

※本リリースに記載されているその他の社名・商品名は、各社の商標または登録商標です。

【報道関係者からのお問い合わせ先】

三井情報株式会社

広報・CSV推進室

TEL : 03-6376-1008 E-mail : press-dg@mki.co.jp

【本製品サービスに関するお問い合わせ先】

三井情報株式会社

バイオヘルスケア営業部

TEL : 03-6376-1291 E-mail : bio-contact-dg@mki.co.jp