

創薬支援 *in silico* サービス 『ACISS』 提供開始

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ（京都府京都市、代表取締役社長：村上竜太）は、インシリコ創薬に基づく受託研究・解析サービスの実施・販売に関して、株式会社アフィニティサイエンス（東京都港区、代表取締役社長：田坂友彦）と業務提携を行い、創薬分野向けの新サービス ACISS (Affinity-Constella *In Silico* Support) サービスの提供を本日3月13日より開始いたします。

【ACISS サービスについて】

ACISS サービスは、インシリコ創薬 (*in silico* drug discovery) 技術に基づく、医薬品・農薬、化粧品等の創薬研究開発支援を目的とした受託研究・解析サービスになり、アフィニティサイエンスと京都コンステラ・テクノロジーズが共同で提供するサービスです。両社のコア技術・各種ソフトウェアを組み合わせることにより、高速・高精度のインシリコスクリーニング、ターゲット予測、*de novo* デザイン、精密ドッキング解析等の計算業務実施や、またお客様のご要望に応じた最適なソフトウェア・システムの導入支援等、優れた費用対効果でトータルに創薬研究をサポートいたします。

本サービスの利用により、従来手法と異なるアプローチ、論理的な薬物設計が可能となり、新薬開発コストの縮減、開発期間の短縮が見込め、プロジェクトを効率的に進めることが可能となります。

【コア技術】

■CGBVS (Chemical Genomics Based Virtual Screening) :

既知相互作用情報を機械学習することにより、未知のタンパクリーガンドの相互作用を予測する計算手法です。標的タンパクの立体構造を必要とせず、化合物探索以外にターゲット予測や化合物デザインへの応用も可能です。京都大学開発の特許技術として、受託計算やシステム提供の他、スーパーコンピュータ「京」での実施例など多くの実績があります。

■ファーマコフォアベーススクリーニング :

生物学的活性を担うと考えられる化学的特徴の集合・空間配置 (ファーマコフォア) を用いて、化合物データベースから医薬候補化合物をスクリーニングする手法です。ファーマコフォアモデルの構築には、標的タンパクの立体構造を利用する構造ベース、また活性化合物の構造式情報のみを利用するリガンドベースの2種類の方法を利用する事ができます。

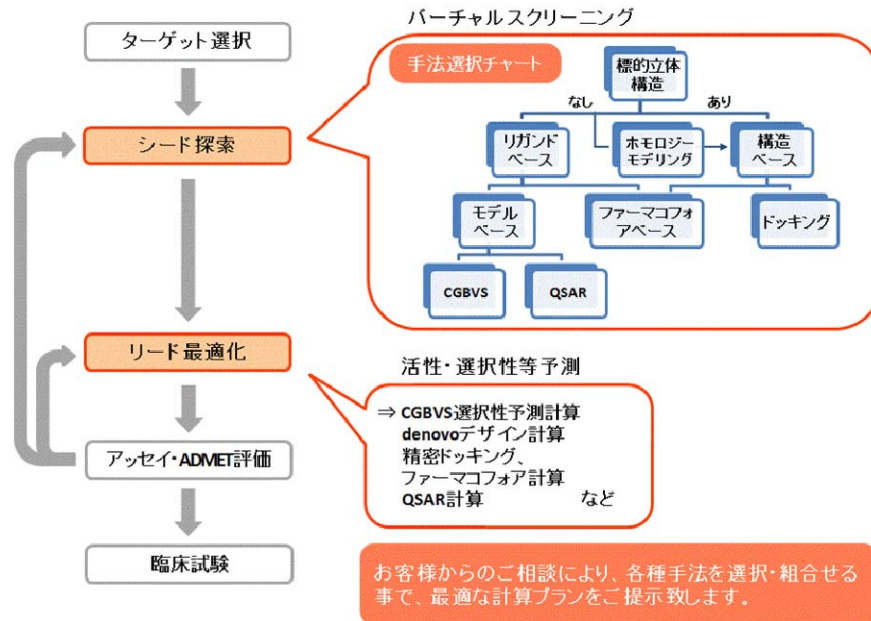
■ドッキングシュミレーション法 :

標的タンパク質の立体構造モデルを用いたシミュレーション解析により、活性ポケットに結合する化合物を探索します。結晶構造が解明されていない標的に対しては、高相同性タンパク質の立体構造を鋳型としたホモロジーモデリングを行い、解析に利用する事も可能です。

■*de novo* デザイン :

京都大学と京都コンステラ・テクノロジーズが共同開発した最新技術により、新規化合物のデザインを提供しています。フラグメントベース設計で生み出される化合物バリエーションをCGBVSで高速に評価し、さらにPSO (粒子群最適化) 等の最適化アルゴリズムと組み合わせる事により、計算機の中で効率的に候補化合物を絞り込む事が可能です。

創薬プロセスにおける計算活用の例



【ACISS サービスの概要】

■ サービス名称

ACISS (Affinity-Constella *In Silico* Support) サービス

■ 提供開始日

2015年3月13日(金)

■ サービス利用形態・料金

ACISS サービス提供価格は、『基本料金』+『個別計算料金』の合計額となり、利用形態としては、年間契約とスポット契約(依頼毎の契約)のいずれかをお選びいただけます。

本サービスの詳細、価格やご注文方法については、下記までお問い合わせください。

【会社紹介・お問い合わせ先】

●株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ

京都大学発ベンチャー企業として2008年3月に設立され、同大学奥野恭史教授の開発技術「相互作用マシニング法(CGBVS)」をコア技術として、創薬研究支援事業、医薬品副作用の情報解析事業など、最先端の計算科学技術によるサービス・製品を提供しています。

〒604-8156 京都市中京区山伏山町558 三洋室町ビル304号

電話：075-241-9672 電子メール：customer@k-ct.jp

URL：http://www.k-ct.jp/

●株式会社アフィニティサイエンス

産官学研究機関の創薬研究支援事業、ソフトウェア・システム導入支援事業の豊富な実績を基に、最先端の計算科学技術を用いたサービス・製品を提供しています。

〒107-0052 東京都港区赤坂4-1-1 SHIMA 赤坂ビル

電話：03-6234-4095 電子メール：sales@affinity-science.com

URL：http://www.affinity-science.com/