

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2013 年 12 月 19 日(19.12.2013)



(10) 国際公開番号
WO 2013/187468 A1

- (51) 国際特許分類:
C12M 1/34 (2006.01) *C12Q 1/00* (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2013/066323
- (22) 国際出願日: 2013 年 6 月 13 日(13.06.2013)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2012-134261 2012 年 6 月 13 日(13.06.2012) JP
- (71) 出願人: 学校法人沖縄科学技術大学院大学学園 (Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University) [JP/JP]; 〒9040412 沖縄県国頭郡恩納村字谷茶 1 9 1 9 - 1 Okinawa (JP). 特定非営利活動法人システム・バイオロジー研究機構(The Systems Biology Institute) [JP/JP]; 〒1080071 東京都港区白金台 5 - 6 - 9 ファルコンビル 5 F Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 北野 宏明(KITANO, Hiroaki); 〒9040412 沖縄県国頭郡恩納村字谷茶 1 9 1 9 - 1 学校法人沖縄科学技術大学院大学学園内 Okinawa

(JP). シーン, クンイー (HSIN, Kun-yi); 〒9040412 沖縄県国頭郡恩納村字谷茶 1 9 1 9 - 1 学校法人沖縄科学技術大学院大学学園内 Okinawa (JP). ゴーシュ, サミック (GHOSH, Samik); 〒1080071 東京都港区白金台 5 - 6 - 9 特定非営利活動法人システム・バイオロジー研究機構内 Tokyo (JP).

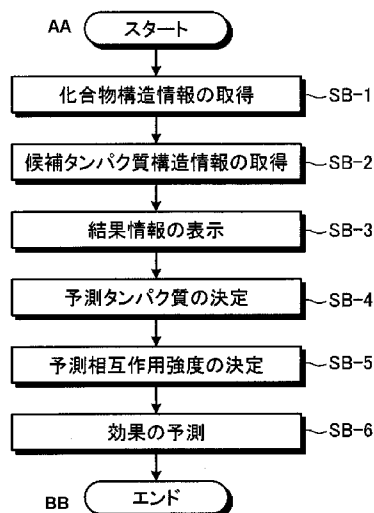
(74) 代理人: 酒井 宏明(SAKAI, Hiroaki); 〒1006020 東京都千代田区霞が関三丁目 2 番 5 号 霞が関ビルディング 酒井国際特許事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

[続葉有]

(54) Title: INTERACTION PREDICTION DEVICE, INTERACTION PREDICTION METHOD, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: 相互作用予測装置、相互作用予測方法、および、プログラム



- SB-1 Acquisition of information related to compound structure
SB-2 Acquisition of information related to structure of candidate protein
SB-3 Display of result information
SB-4 Determination of predicted protein
SB-5 Determination of predicted interaction strength
SB-6 Prediction of effect
AA Start
BB End

(57) Abstract: Provided is an interaction prediction device that: acquires information related to the structure of a compound; acquires candidate protein structure information for a candidate protein that interacts with the compound; calculates the bonding strength between the candidate protein and the compound using a docking simulation method; determines a predicted bonding strength that is the bonding strength predicted by carrying out an overall evaluation of bonding strength; determines a predicted protein that is a candidate protein predicted to interact with the compound; calculates the interaction strength using a bonding strength simulation method; and determines a predicted interaction strength that is the interaction strength predicted by carrying out an overall evaluation of interaction strength.

(57) 要約: 本発明は、化合物構造情報を取得し、化合物との相互作用の候補タンパク質の候補タンパク質構造情報を取得し、ドッキングシミュレーション手法を用いて候補タンパク質と化合物との結合強度を算出し、結合強度の総合評価を行うことにより予測される結合強度である予測結合強度を決定し、化合物と相互作用することが予測される候補タンパク質である予測タンパク質を決定し、結合強度シミュレーション手法を用いて相互作用強度を算出し、相互作用強度の総合評価を行うことにより予測される相互作用強度である予測相互作用強度を決定する。



(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR),

OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))