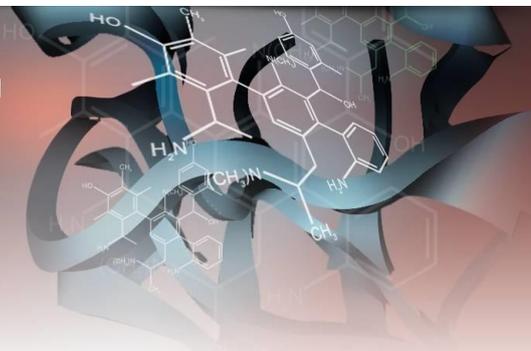


The world's first integrated
predictive platform for
drug discovery and
safety evaluation



情報計算化学生物学会 2016 年大会 ランチョンセミナー

創薬研究・医薬品開発のための包括的支援システム

PROUS INSTITUTE SYMMETRY のご紹介

日時：2016 年 10 月 25 日（火）12:00 - 13:30

会場：タワーホール船堀 4 階研修室

本ランチョンセミナーでは、Prous Institute 社の開発責任者である Dr. Josep Prous から Prous Institute SYMMETRY を用いた医薬品の研究開発の生産性向上について、複数の検証事例を交えて講演します。

Increasing Drug R&D Productivity Through Advanced Predictive Analytics Technologies

「講演者」

Dr. Josep Prous, Jr. (Vice President of R&D, Prous Institute of Biomedical Research)

「要旨抄訳」

医薬品の研究開発は長い期間と多くの費用を必要とし、生物医学研究の複雑さや製薬業界の増大する競争圧力に関連した課題に直面しています。この課題に対して Prous Institute 社は、薬理活性の解明、オフ・ターゲットの作用機序の同定、潜在的な毒性や安全性の問題の早期の評価を含む革新的な *in silico* ソリューションを開発してきました。

このアプローチは、米国食品医薬品局 (FDA) のような規制機関や政府機関が意思決定過程で新しい治療プロファイルを評価するためにコンピューター技術の利用を取り入れていくというトレンドと同調しています。予測モデルを構築するために、商用データ、公共データベース、自社のラボから得られた実験情報を組み合わせて使います。さらに、必要なデータを得るために学術機関や FDA のような規制当局と共同研究契約を締結しています。Prous Institute 社のアプローチは、深層学習(ニューラル・ネットワーク)、ロジスティック回帰、マルチ・ラベル分類を含む高度な公知または独自のアルゴリズムの組み合わせに基づいています。

本ランチョンセミナーでは、医薬品の研究開発における高度な予測技術の検証例をいくつか紹介します。

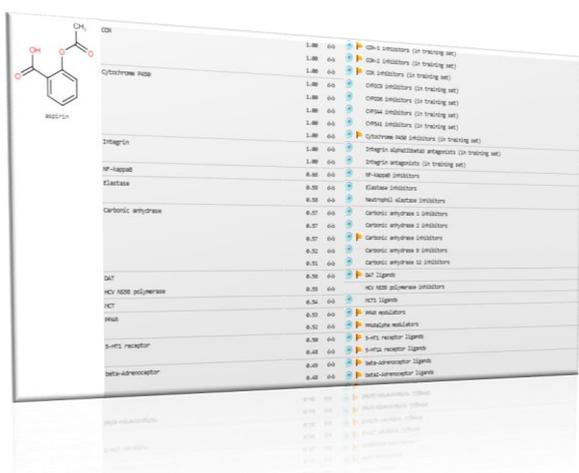


PROUS INSTITUTE
for Biomedical Research

Ryoka
Systems
Inc. 株式会社
菱化システム

Prous Institute SYMMETRY は、創薬の探索段階から開発研究、承認までのプロセスの各段階において迅速かつ確かな意思決定を強力に支援します。SYMMETRY に搭載されているグローバル作用機序モデルは、化合物の構造式から標的タンパク質と作用機序を予測します。

SYMMETRY グローバル作用機序モデル



SYMMETRY グローバル作用機序モデルは、化合物の構造式を入力すると、約 1,200 の作用機序の中から、それぞれの化合物が関係する作用機序を予測します。対象となる作用機序には、治療に有効なオンターゲットの他に安全性や毒性に影響をもたらすオフターゲットも含まれます。

- ◇ 約 1,200 の作用機序の中から関係する作用機序を予測
- ◇ 治療対象の薬理的オンターゲットだけでなく毒性や有害事象(オフターゲット)も予測
- ◇ 独自開発のマルチ・ラベル・アルゴリズムにより複数の作用機序を同時に予測
- ◇ トレーニングセットから近傍のアナログや出典を表示
- ◇ データ・サイエンティストがキュレーションした
100 万化合物に及ぶトレーニングセット

