

情報計算化学生物学会 2017 年大会 ランチョンセミナー

ターゲット・作用機序予測プラットフォーム Chemotargets CLARITY のご紹介

日時：2017 年 10 月 3 日（火）12:00 - 13:30

会場：タワーホール船堀 4 階研修室

株式会社モルシスは研究開発向けソフトウェア専門ベンダーです。株式会社菱化システム科学技術システム事業部のソフトウェア事業を引き継いで、平成 29 年 4 月 1 日に営業を開始しました。モルシスの社名は事業領域である Molecular Simulation & Informatics Systems に由来します。

本ランチョンセミナーでは、2017 年 7 月に販売を開始しました Chemotargets 社のターゲット・作用機序予測プラットフォーム Chemotargets CLARITY を紹介します。Chemotargets 社の社長である Dr. Jordi Mestres から Chemotargets CLARITY を用いた化合物の有効性や安全性の予測について、いくつかの事例を交えて講演します。

<<演題>>

Chemotargets CLARITY: An Advanced Analytics Platform for Predictive Pharmacology and Safety

<<講演者>>

Dr. Jordi Mestres (President, Chemotargets, S.L.)

<<要旨>>

The recent explosion of heterogenous data for millions of small molecules in a range of diverse areas of relevance to drug discovery offers a wealth of opportunities for using that data to build predictive models for pharmacology, safety and therapeutics but also poses challenges to develop advanced analytics tools that allow for visualizing its complexity in a highly compact and interpretable manner.

In this regard, Chemotargets CLARITY is an advanced analytics platform that allows for linking chemistry, pharmacology, and safety data. You can use it under multiple scenarios:

- As a pure analytics platform: to interrogate and visualize all pharmacology and safety data known on all your internal small molecules, if internal proprietary data from projects is linked underneath, or on any other small molecule present in any database from public sources or licensed from third-party vendors
- As a predictive analytics platform: to predict the pharmacology and safety profiles of small molecules, drawn or uploaded as smiles or SD files. It uses 10 different ligand-based methodologies exploiting both public and patent data. Useful to anticipate unexpected off-target pharmacology and to perform target deconvolution of phenotypic hits
- As a predictive analytics platform and model builder: to predict the pharmacology and safety profiles of small molecules, using the internal ligand-based target and safety models provided by the platform, and to have the ability to construct models from data of your own molecules and/or third-party databases. Best option to ensure that all models are derived from data on small molecules that cover your internal chemical space.



CHEMOTARGETS CLARITY

Empowering **Data Science** based
drug discovery & development



Chemotargets CLARITY の特長

- ターゲットとの親和性を予測する 6 種類の計算手法
- 安全性との関連を予測する 4 種類の計算手法
- 代謝物を予測する知識ベースの計算手法
- 100 万化合物に及ぶ大規模なトレーニング・セット
- データ・サイエンティストによる特許や論文のキュレーション
- ChEMBL などの公共データベースや FAERS データも収載

Chemotargets CLARITY の活用領域



- 化合物ライブラリーの仮想スクリーニング
- 標的タンパク質決定後の解析
- ドラッグ・リポジショニング
- 潜在的な毒性や安全性の問題の予測
- オフ・ターゲットの相互作用の判別
- 代謝物に関連する安全性問題の把握



Chemotargets 社 日本代理店

株式会社モルシス ライフサイエンス部 www.molsis.co.jp

〒104-0033 東京都中央区新川 1-28-38 東京ダイヤビル

T E L : 03-3553-8030 F A X : 03-3553-8031

メール: sales@molsis.co.jp