

知識ベースを活用した医薬品開発の効率化とリスク低減

日時：2018年10月9日 12:00 - 13:30

会場：タワーホール船堀 4階 研修室

知識ベースを活用した化合物の薬理活性予測と化合物／ターゲットの両面からの潜在的な安全性の問題の把握は、医薬品開発の効率化とリスク低減には重要である。

Chemotargets 社の Chemotargets CLARITY は、化合物構造から作用機序と有害事象のエンドポイントを予測し、探索段階からオン／オフ・ターゲットと潜在的な安全性の問題の把握を支援する。また、BioInfoGate 社の OFF-X は、1 万件以上のターゲットを監視して医薬品・ターゲット・有害事象について包括的な情報システムとして最新の安全性アラート情報を提供する。

本ランチョンセミナーでは、Chemotargets CLARITY と OFF-X の開発責任者を招聘し、最新の製品情報とともに、医薬品・ターゲット・副作用のトータル・ソリューションによる医薬品開発の効率化とリスク低減について紹介する。



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 万化合物を超える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

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

特長

- 医薬品のターゲット（作用機序）と有害事象で分類された包括的な情報システム
- 多数の薬物クラスに関係のある既知および新規の安全性問題の両方を収載
- 幅広い情報源で報告された新規の安全性問題のアラートサービスを毎日提供

活用領域

- パイプライン中のターゲットや新規のターゲットの安全性問題の把握
- ターゲットと安全性転帰の間に成り立つ直接的な作用上の関連を判別
- オフ・ターゲット効果の仮説と実験評価系の立案を支援
- 化合物に関連した有害事象か、ターゲットに関連した有害事象かを判定
- 特定の薬物クラスに関連する規制当局の関心の監視
- トランスレーショナル・リサーチの戦略の観点から in vitro アッセイと臨床転帰との相関を判別



Chemotargets 社／BioInfoGate 社 日本代理店
株式会社モルシス ライフサイエンス部

TEL: 03-3553-8030 E-mail: sales@molsis.co.jp

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

CHEMOTARGETS CLARITY®: AN INTELLIGENCE AND ANALYTICS PLATFORM FOR PREDICTIVE PHARMACOLOGY AND SAFETY OF SMALL MOLECULE DRUGS AND COSMETIC INGREDIENTS

Jordi Mestres, President, Chemotargets SL, jordi.mestres@chemotargets.com

There is an increasing amount of pharmacology and safety data available for small molecule drugs and cosmetic ingredients that requires purposely designed predictive analytics platforms. This is very important for the pharmaceutical industry but even more so for the cosmetics industry, as pressure on reducing animal testing is rising worldwide.

We introduce here some of the new features implemented in Chemotargets CLARITY® v3.0:

- New pharmacology data: the chemical space with pharmacology data has increased from 1.3 to 2.4 million molecules in v3.0
- New Drug Explorer: it allows the user to navigate on all pharmacology and safety data, both known and predicted, available for drugs, both in the public domain as well as in patents
- New FAERS Explorer: the FDA Adverse Event Report System (FAERS) contains currently almost 10 million post-marketing records; the user can interrogate this data and extract the most important safety signals present in it
- MedChem Dashboard: new SAR tables allow the chemists to easily identify pharmacology trends on substitution patterns



OFF-X

Early identification of target mechanistic liabilities

APPLICATIONS OF THE INTEGRATED TRANSLATIONAL SAFETY INTELLIGENCE PORTAL OFF-X IN DE-RISKING DRUG R&D PROJECTS

Josep Prous Jr., Vice President, Bioinfogate, jprous@bioinfogate.com

Reducing costs associated with unexpected safety issues is one way to optimize productivity in drug R&D. Against this background, interest in secondary pharmacology has steadily grown in recent times.

When considering opportunities for therapeutic intervention with new bioactive molecules, it is essential to identify not only beneficial mechanisms of action but also those which could be linked to undesired off-target activities leading to potential safety issues.

Likewise, the ability to explain rapidly why a certain adverse event was observed during a new drug's clinical or pre-clinical development by assigning this safety issues to specific targets is of utmost importance.

To address these challenges, Bioinfogate has developed OFF-X (www.targetsafety.info), the translational safety intelligence portal, that allows scientists and professionals involved in drug R&D to be promptly informed of target modulating effects leading to preclinical toxicity or clinical adverse events.

During the luncheon seminar, the conceptual framework applied to developing OFF-X will be presented, alongside selected case studies from real-life pharmaceutical industry situations.