



創薬ビッグデータを利用した予測と解析

企業セッション ES-01 10月27日(火) 13:00 ~ 14:30

多種多様な機能が要求される創薬のツールより、タンパク質から微生物分野まで幅広く情報を網羅している創薬支援統合システムである「LSKB」と、化合物の標的、安全性評価には欠かせない「Chemotargets Clarity®」、基礎研究からトランスレーショナルリサーチまでに対応した開発管理プラットフォームである「SAPIO Exemplar LIMS」のご紹介をします。

[こちらでも紹介しています : http://www.w-fusion.co.jp](http://www.w-fusion.co.jp)

1. 創薬候補となる化合物やターゲットを効率良く探し出すソフトウェア LSKB

緑川 淳(株式会社ワールドフュージョン)

LSKB搭載データとアルゴリズムのご紹介

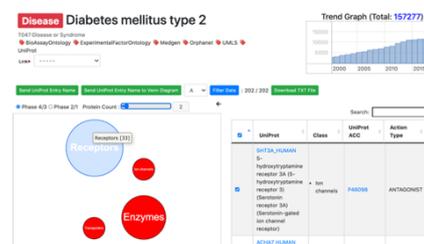


★ ターゲット探索、ドラッグ・リポジショニング、適応症調査、メカニズム探索への応用例

LSKBの活用事例のご紹介

多くの探索機能のうち、以下の活用事例のご紹介をおこないます。

- 遺伝子発現データから作用機序を基に効率良く化合物候補を絞る
- 疾患からターゲットや化合物を探す手法
- 構造検索を含む化合物情報とオミックス情報の統合的な解析
- 探索結果化合物構造を CCG 社 MOE にて解析



LSKBの最新バージョンのご紹介

最新バージョンでは、データの更新とともに、ワークフロー機能を搭載し、複雑な情報の探索を可能にし、疾患⇄ターゲット間、疾患⇄薬剤間双方向の関連情報の重要度や新たな関係性を提示するアルゴリズムを搭載したと同時に微生物の探索機能を追加しました。

2. LSKB を応用した製品やサービスのご紹介

緑川 淳(株式会社ワールドフュージョン)

LSKB は創薬以外にも様々な用途に応用されています。ここでは、当社が行っている開発製品やサービスを簡単に紹介させていただきます。

インハウスデータとの統合による相乗効果が期待できる商品

- LSKB から派生した製品; Laboserver による 結晶構造解析 データの管理によるメリット

微生物をターゲットとした創薬・化粧品開発への応用

- 機能性菌磨き開発事例
- メタトランスクリプトームデータから代謝化合物とパスウェイを予測
- 日本人の肌フローラと肌タイプデータベースのリリース予告

がん情報文献ナビサービスの無償提供を開始

- LSKB のテキストマイニング技術を利用、がんとがん治療薬に関する文献情報を毎週更新

3. ターゲット 副作用予測による化合物の最適化 CHEMOTARGETS CLARITY

緑川 淳(株式会社ワールドフュージョン)

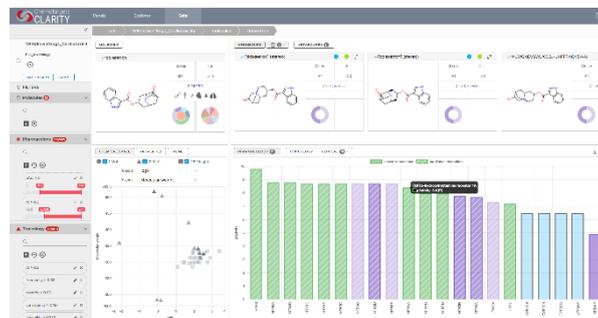


機械学習法や複数のアルゴリズムでターゲット、副作用を予測するソフトウェア Chemotargets Clarity®のご紹介

ターゲットプロファイリングは、最先端の 6 種の計算手法とデータサイエンティストがキュレーションした特許、論文、公共データベース由来の 260 万化合物からなるトレーニングセットから、安全性プロファイリングは、ターゲットプロフィールを加えた 4 種の計算手法と FAERS の解析データから予測します。

データ解析

- ターゲット、副作用解析を行う Drug Explorer
 - ターゲット、活性値、副作用から特徴抽出、ターゲットに關与する副作用の発見
- Scaffold の解析を可能にする MedChem Explorer
 - 活性値保有の化合物や化合物ベンダーの構造の Scaffold を保持
 - 好ましくない特徴を有する化合物から Scaffold Hopping をサポート
- FAERS の解析データから薬理学データとともに多面的解析を可能にする FAERS Explorer
 - シグナル検出された FAERS データとそのバックグラウンドデータとの解析
 - 併用薬や性別 年齢の違いによる作用プロファイル
- 創薬早期から臨床に至るまでの情報を統合する Translational Explorer
 - 早期段階のデータや臨床検査値の変動、副作用の発現状況にいたる変遷



Chemotargets Clarity と LSKB を統合した創薬探索基盤情報システム

- Chemotargets Clarity による予測結果 と 実験結果を LSKB で解析

4. 基礎研究からトランスレーショナルリサーチまで総合管理プラットフォーム SAPIO Exemplar LIMS

牧野 浩美(株式会社ワールドフュージョン)



プロジェクト、サンプル管理、工程管理システムのご紹介 LIMS と ELN の融合による新しい情報管理のあり方

Sapio Sciences 社の Exemplar は ELN と LIMS 機能を備えた新しいタイプのシステムです。

プロジェクトの立ち上げから、それに紐づくサンプルの管理、ELN の機能を利用したテンプレート作成から文書、イメージ等の登録、編集機能と、様々なデータおよび情報の紐づけが可能です。

- ✦ 試薬管理機能で試薬の登録、ロット管理、必要量の計算機能、保存場所管理、など実施
- ✦ NGS 機能のワークフローは基本が準備されており、実際のワークフローに合わせたカスタマイズ
- ✦ API 利用による外部機器との連携も容易
- ✦ LIMS 管理機能は、注文リクエスト、サンプル、消耗品、プロセス、等ニーズに合わせた管理の構築を実施

Copyright World Fusion Co., LTD

株式会社ワールドフュージョン: <http://www.w-fusion.co.jp> : oshirase@w-fusion.co.jp