Patcore

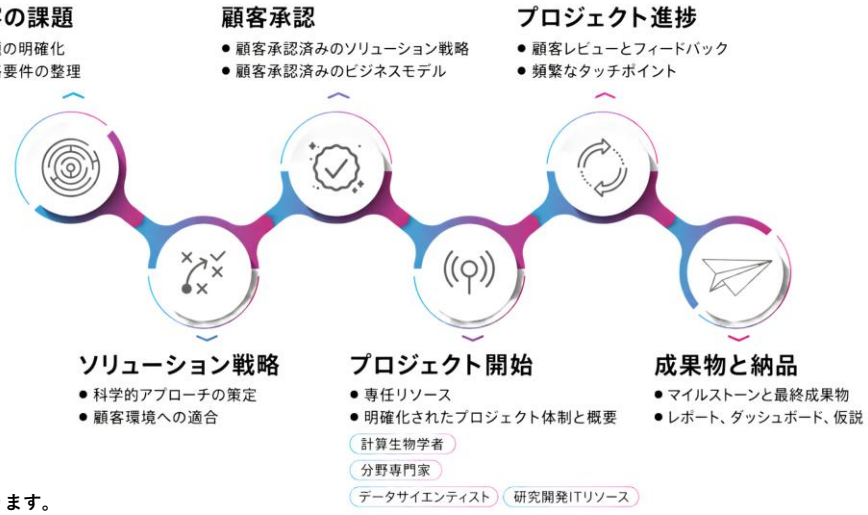
excelra バイオインフォマティックスサービス

インフォマティックスの受託研究サービスにより、お客様が野心的な目標を達成できるよう支援します。
本サービスによる成果（IP）は100%お客様のものになります。※

主なサービス

- ターゲットの特定と優先順位付け
- ドラッグリポジショニング
- 薬剤併用予測
- 作用機序の解明
- 患者の層別化
- バイオマーカーの発見
- データキュレーション
- セマンティクスとオントロジー管理
- マスターデータ管理
- データ分析のためのパイプライン構築

※通常のご契約条件。ご契約の内容により変わる場合があります。



ChemAIRS®

Chemical AI

AI支援型 逆合成経路設計プラットフォーム

ChemAIRSは、化学ビッグデータマイニングと深層学習アルゴリズムに基づき、対象分子を入力するだけで、わずか数分で複数の合成経路を設計。反応の実現可能性、官能基の適合性、キラル合成戦略など合成の重要要素を十分に考慮し、化学者に多様で実現可能な合成アイデアを提供します。

モジュール	説明・特徴
逆合成	深層学習モデルと専門家のルールを組み合わせることで、標的分子の合成経路を迅速に生成可能。
反応条件検索	反応式を入力することで、推奨される条件を確認し、反応の実現可能性とリスクを迅速に評価して、適切な反応条件を選択可能。
不純物予測	生成される可能性のある不純物を予測可能。文献による裏付けも得られ、不純物予測精度は86.1%に達する。
プロセスケミストリー	特定の反応、貴金属反応、危険反応、溶媒および試薬のろ過などの反応パラメータを設定することで、システムがプロセス経路を推奨し、合成コストを計算。
順合成（合成展開）	基本的な分子構成要素を維持しながら、多次元的な構造進化を行い、逆合成経路に基づいて実現可能性の高い仮想分子ライブラリを効率的に生成。
合成可能性評価（SA）	逆合成経路に基づく合成可能性評価。合成経路の実現可能性も考慮するため、従来法より高い精度が得られる。
AI最適化	全因子実験に代わって、AI（ベイズモデル）によるインテリジェントな意思決定を実現。実験計画の策定、多目的プロセス最適化、反復実験による探索シナリオに最適。

- **高精度なルート設計** — 機械学習×専門家ルールのデュアルAIエンジン搭載！
- **圧倒的なデータ量** — 7,000万件超の反応データで確かな根拠をご提示。
- **自社専用に進化** — ローカル環境への導入と独自データの学習でセキュアに最適化。自社ELN連携可能。
- **一気通貫の支援** — モジュール式構成で、ワークフロー全体を徹底カバー。1モジュールから利用可能
- **持続可能性と進化** — グリーンケミストリーへの対応と、継続的なシステムアップデート！

- 高い合成実現性
- 多様な合成戦略
- 革新的アプローチ

パトコア株式会社　✉ info@patcore.com　℡ 03-6256-0331　東京都千代田区丸の内1-7-12サピアタワー26F