

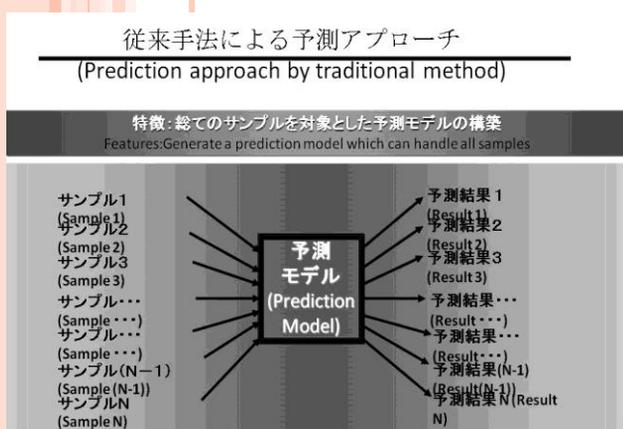
# 「テーラーメイドモデリング」の二大要素

要素1. 予測モデルによる予測の方向性を180度変えたアプローチ

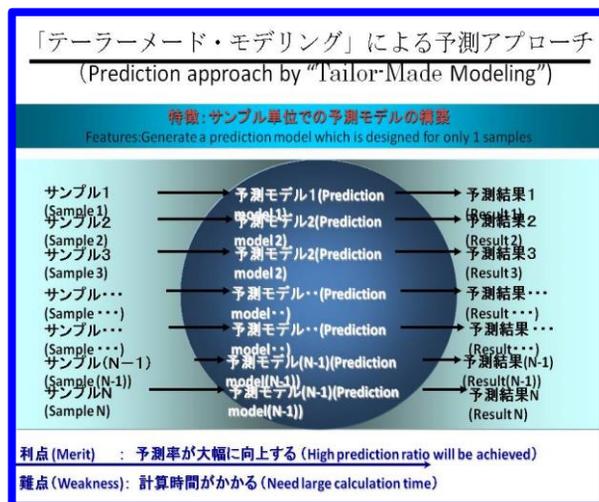
汎用予測モデルから

予測対象サンプル単位の個別予測モデルへ

予測対象化合物単位に予測モデルを構築して予測する



利点 (Merit) : 少ない数の予測モデル作成で済む (Small number of prediction models are generated)



利点 (Merit) : 予測率が大幅に向上する (High prediction ratio will be achieved)

弱点 (Weakness) : 計算時間がかかる (Need large calculation time)

## 従来手法:

予め設定されたサンプル群を用いて予測モデルを構築。予測時はこの予測モデルを適用して予測

## 問題点1:

予測モデルが予め構築されているので、いわゆる機製品となる。この結果、常に平均的な予測結果となる。

## 問題点2:

訓練用サンプルが増えると、予測モデルの再構築が必要で、メンテナンスが常に必要となる。

## テーラーメイドモデリング:

予測対象化合物単位に予測モデルを構築。予測時はこの個別に創出された予測モデルを適用して予測。

予測モデルは化合物単位に作成され、他の化合物には利用されないのので、最高の予測パフォーマンスを有するものとなる。

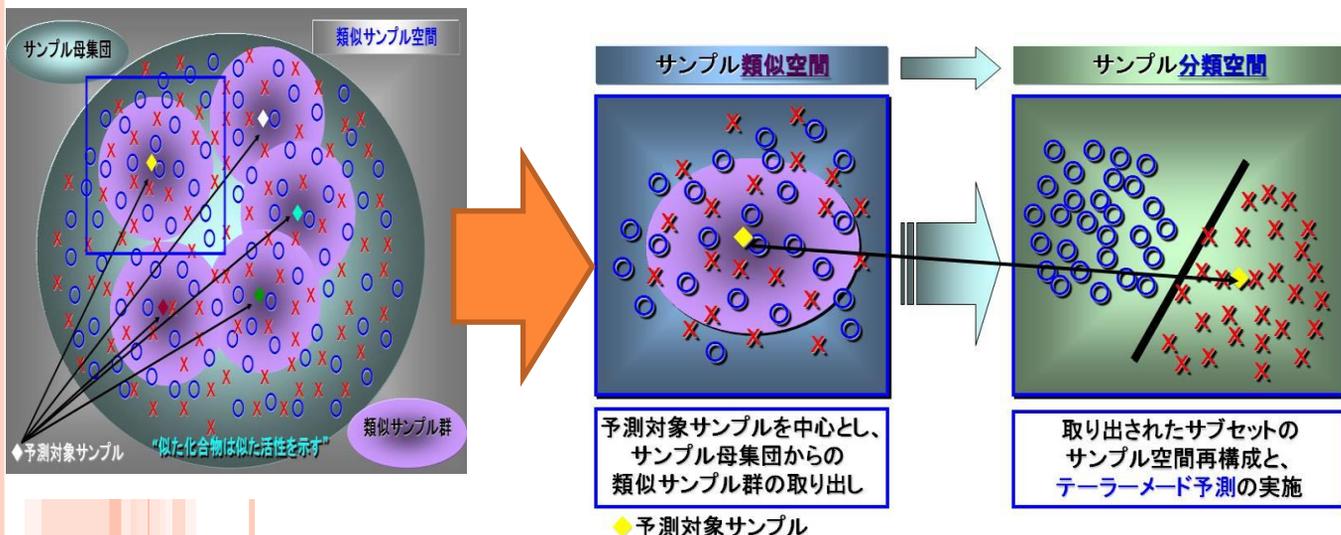
## 利点:

予測対象化合物単位に予測モデルが構築されるので、予測性は化合物単位で最高のパフォーマンスを有する。

## 要素2. 化合物と種々特性との基本関係に基づいたアプローチ 「似た化合物は似た活性を有する」

サンプル母集団からの予測用サンプルの取り出し

予測用サンプルの取り出しと、テラーメード予測



### 特徴:

#### 1. 予測精度／信頼性の大幅な向上

予測化合物に類似した化合物群のみを用いて予測する。この結果、予測率低下の原因となるノイズ情報が入らなくなるため、予測精度／信頼性が大きく向上する

#### 2. サンプル数増大によるデータ解析精度の低下を防げる

予測対象化合物と相関の高い化合物だけが学習用サンプルデータとして利用されるので、学習用サンプル数が多くならない。

#### 3. メンテナンスフリーの実現

サンプル数増大に伴う予測モデルの再構築の必要が無い場合、新規化合物は元の母集団に追加するだけで良い。このために、基本的にメンテナンスフリーとなる

#### 4. 総てのデータ解析手法が適用可能

予測対象サンプルに関連して選択されたサンプル群は単なるサンプル群のサブセットである。従って、このサブセットに対して総てのデータ解析手法が適用可能であり、常にノイズの無いデータ解析を期待することが出来る

テラーメードモデリングの基本概念は、  
総ての化学データ解析手法に適用可能で重要な技術