

2013年、新年のご挨拶

株式会社インシリコデータは
夢の「**一段階創薬**」実現目指し、
日々の研究と技術を蓄積してまいります

* 「統合概念」から「並列創薬」に発展、そして夢の「一段階創薬」目指して
創薬を考える時、化合物の特性を考えるならば薬理活性、ADME、毒性（安全性）そして物性を同時、且つ総合的に考察することが重要であるという「**統合概念(Integrated concept)**」を発表してから約10年経ちました。現在は、この考えを引き継ぎつつ発展させた、新たな「**並列創薬(Parallel drug design)**」として展開しております。この21世紀型の創薬となる「並列創薬」は、インシリコ技術を基本とし、前記総ての化合物特性を考慮しつつ創薬展開するものです。この「並列創薬」の究極の形が、総ての創薬業務が一段階の合成で完了する、「**一段階創薬 (One step drug design)**」となります。

* 「一段階創薬」を目指した時の予測率の問題

「並列創薬」から「一段階創薬」に進める時に必要な事は、新規化合物を対象とした時の薬理活性／ADME／毒性／物性の予測を完全なものとする事です。これらの予測を高い精度で行う事は、一昔前は極めて難しい事でした。このために「一段階創薬」は夢のまた夢となっていました。残念ですが、この状況は引き続き現在でも現実の問題です。

* 予測率向上を目指した新規技術の開発

予測に関する技術自体も時間の経過や技術の発展とともに大きく変化し、進歩しています。株式会社インシリコデータの湯田は、極めて予測の困難な本分野に適用することを目指した「**KY(K-step Yard sampling)法**」を新たに開発しました。この手法により、予測率同様に重要な指標である分類率の100%達成を実現しました。この「KY法」に関する一連の手法に関する特許出願は済んでおり（JP, USA, EU）、既に一部は特許化されております。今後順番に特許化されるでしょう。

また、化学や化合物の特性を利用し、与えられたサンプル群を用いた場合に、その最大の予測効率を実現する「**テーラーメイドモデリング(Tailor made modeling)**」の特許化も実現しました。この技術は最近展開されている多くの予測システムでの目玉機能として取り込まれることが多くなりました。しかし、私が特許を出した5年前には、殆ど考えられていなかった技術でした。既にこれらの技術が現実のものとなっています。

株式会社インシリコデータは
予測率向上を目指した革新的な技術
「KY (K-step Yard sampling)法」
「テーラーメイドモデリング(Tailor made modeling)」
の二大技術を開発し、特許化および申請済みです

*** インシリコデータが開発した予測率向上のための二大技術**

- ・「KY (K-step Yard sampling)法」
- ・「テーラーメイドモデリング(Tailor made modeling)」

インシリコデータが独自に有する「KY法」と「テーラーメイドモデリング」の二つの技術を合わせただけでも、従来のデータ解析技術を合わせたシステムとは比較にならないポテンシャルを持つようになります。これに合わせて、インシリコデータが有する本研究分野での長い実績と多数のノウハウを組み合わせることで、インシリコデータが提唱する「並列創薬」の実現と、その究極の形である「一段階創薬」目指して進んでいきます。

*** インシリコデータは「一段階創薬(One step drug design)」の実現目指し、
一歩ずつ着実に進んで参ります。**

現在夢とされている「一段階創薬」は、時間の経過とともに着実にすこしずつ近づいています。株式会社インシリコデータは、この「一段階創薬」をいつまでも”夢”として固定するのではなく、必ず達成出来る目標として活動してゆきたいと思います。インシリコデータは、「一段階創薬」の実現目指して今後とも頑張ります。

*** インシリコデータは様々な分野に挑戦してまいります**

インシリコデータが独自に開発した技術と、長期にわたり構築および経験してきた化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)ノウハウを駆使しつつ、「インシリコ薬理活性/ADME/毒性(安全性)/物性スクリーニング」を基本として以下のような様々な分野にチャレンジ致します。

- ・創薬のみならず化合物環境分野でも重要となる「化合物毒性評価」研究分野への展開
- ・動物保護団体等が強く提唱している「動物実験禁止」に向けた「動物実験代替法」としてのインシリコスクリーニング手法の展開と開発

2013年1月1日
(株) インシリコデータ
湯田 浩太郎