

インシリコデータ独自保有技術

□インシリコ毒性スクリーニング関連適用技術

◇データ解析関連技術

KY (K-step Yard sampling) 法

- データ解析に全く新しい概念を取りこんだ手法
サブグループ化、および繰り返し操作
- 毒性スクリーニングに求められる、極めて強力な分類力と
フィッティング力を有する
- サンプル数が大きくなっても原理上解析力の低下はない
ビッグデータへの対応が本質的に可能

* 開発済みKY法:

- ニクラス分類KY法; 3手法*1
- 重回帰KY法: 3手法*1
- クラスタリングKY法
- 主成分解析KY法

◇化学関連汎用技術

テラーメードモデリング*1

- 総ての既存データ解析手法で適用可能
- 原理的に、システムの自動化がしやすい
- 予測モデルを予め構築する事が無いのでメンテナンスフリー実現

◇創薬/化合物開発関連技術/提案

- 3D-QSAR関連:SARD法*2

Structure Activity Relationships by Domain methods

◇その他の関連技術/提案

- 汎用データ解析手法:超球法(Hyper Spear methods)

*1;JP, EU, USA 特許承認および審査中

*2;USA特許化済み

インシリコデータ独自提案

□ インシリコスクリーニング関連提案

1. 「インテグレートド概念」
創薬は化合物に関する総ての特性(薬理活性/ADME/毒性/物性)を同時に考慮しながら実施するという概念
2. 「リード・リトリーバル」
化合物データベースからリード化合物を探し出す手法
*「インシリコ薬理活性スクリーニング」
3. 「リード・リコンストラクション」
薬理活性に関係の深い部分構造を用いて、新規のリード化合物を自動創出する手法
*「バーチャル化合物創出+インシリコスクリーニング」
4. 「マルチアクティビティスクリーニング」
複数の薬理活性をターゲットに、同時スクリーニングを行う
*「ドラッグ・リポジショニング」

□ 創薬/化合物開発関連提案

1. 「並列創薬」
「インテグレートド概念」に基づき実施する創薬
2. 「インシリコンビ」
「インシリコスクリーニング」と「コンビナトリアルケミストリー」技術を組み合わせ、DRYとWET技術の連携を実現

□ 創薬手法およびデータ解析手法の提案

1. 「SAR (Structure Activity Relationships by Domain)」
領域論に基づいた3D-QSDAR手法
2. 「超級法」
超球理論に基づいた汎用的データ解析手法