



# CHEMOTARGETS CLARITY

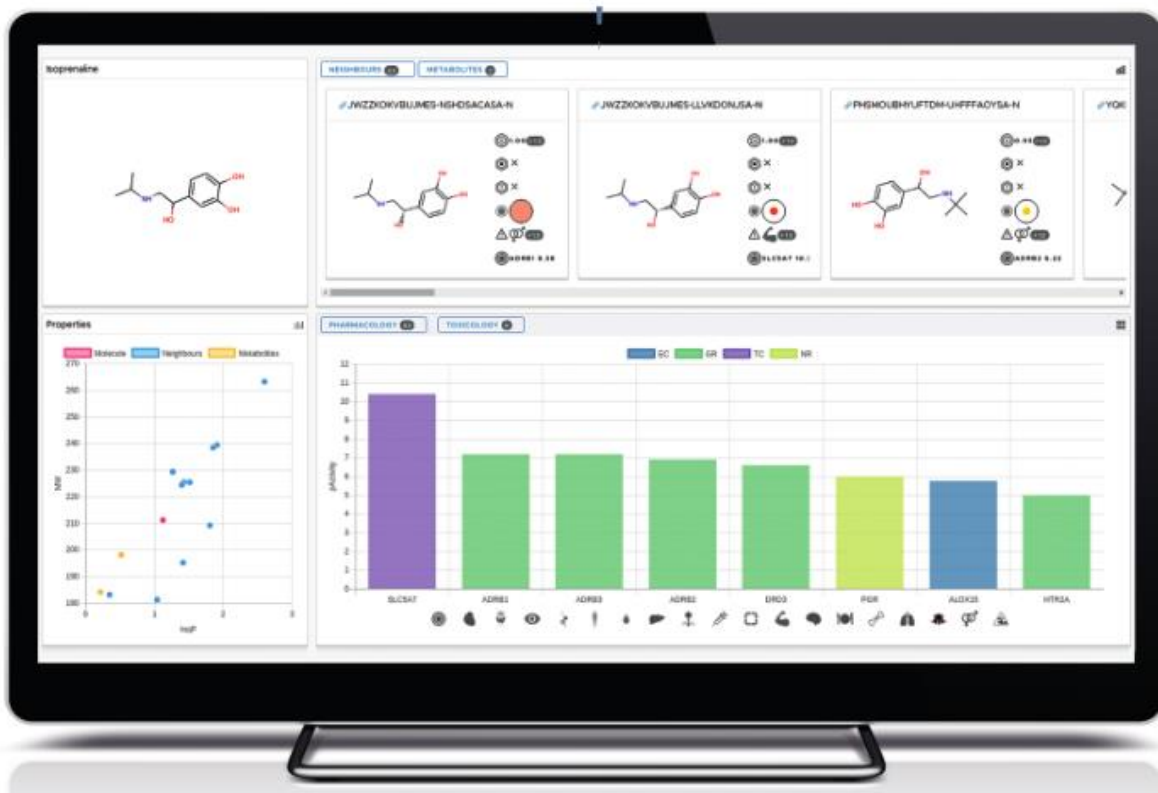
## ターゲット／作用機序／代謝物の予測 有効性と安全性のプロファイリング

Chemotargets 社が開発した CLARITY はターゲット・作用機序予測プラットフォームです。スペインの公的研究機関 IMIM からスピンオフした Chemotargets 社は創薬研究支援システムを開発するベンチャー企業であり、最先端の計算手法を幅広く搭載した統合プラットフォームを開発しています。

オンターゲットを予測する有効性プロファイリングやオフターゲットを予測する安全性プロファイリングは、最先端の 10 種類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 100 万化合物におよぶトレーニングセットにより予測します。代謝物はデータベースに基づいて知識ベースの計算手法で予測します。代謝物の有効性や安全性のプロファイリングも合わせて予測します。

### 利用目的

- 医薬品開発初期段階における化合物の毒性や副作用に関するリスク評価
- オンターゲットやオフターゲットの幅広い生物学的活性の予測
- 有効性と安全性のプロファイリングによる薬剤比較
- 代謝物の構造とその有効性や安全性のプロファイリングの予測
- オフターゲットによる副作用とその作用機序の予測
- 開発・販売中止された医薬品や化合物のリスク再評価
- 開発・販売中止された医薬品の新規治療薬としての可能性評価
- 医薬品の適応拡大の可能性評価



### 使いやすいユーザーインターフェース

- ウェブブラウザに SD ファイルを読み込むだけで解析を実行
- SD ファイル中の全化合物の予測結果をカード形式で分かりやすく一覧表示
- 化合物の予測結果はリードアクロスや代謝物、有効性や安全性のプロファイルをグラフやテーブルで表示

## 有効性プロファイリングの特長

- 6種類の計算手法により化合物の構造から有効性のプロファイリング
  1. Similarity (with optimized applicability domains)
  2. SAR: SAS-based QSAR models
  3. SAS: Simplest Active Subgraphs
  4. SEA: Similarity Ensemble Approach
  5. MLM: Machine Learning Methods
    - Neural Networks
    - Random Forest
    - Support Vector Machines
  6. XPI: Cross-pharmacology indices
- 各計算手法の結果をまとめた信頼性スコア
- 活性値や信頼性スコアによるフィルタリング
- 特許、文献、学会議の情報などをキュレーションした100万化合物におよぶトレーニングセット
- 独自データによるトレーニングセットの構築

## 安全性プロファイリングの特長

- 4種類の計算手法により化合物の構造から安全性のプロファイリング
  1. Ligand-based (構造の類似性)
  2. Fragment-based (毒性フラグメント)
  3. Target-based (標的タンパク質)
  4. Pathway-based (標的が含まれるパスウェイ)
- 各計算手法の結果をまとめた信頼性スコア
- 6,000以上の副作用用語
- 動物試験や培養細胞など前臨床の毒性モデル搭載
- 有害事象解析による重篤度スコアを搭載
- 信頼性スコア、頻度や重篤度によるフィルタリング
- 組織別カテゴリーによる組織別毒性プロファイリング

## 代謝物予測とプロファイリングの特長

- 知識ベースの計算手法による代謝物の予測
- 1,791種の基質構造に関連した8,961種の代謝物の構造変換(71種類に分類)のデータベース
- 代謝物の有効性と安全性のプロファイリング

### CLARITY と OFF-X を組み合わせた活用例

CLARITY の開発元である Chemotargets 社と OFF-X の開発元である BioInfoGate 社は緊密に連携しています。CLARITY で予測した化合物のターゲットに対して OFF-X で最新の安全性情報を取得できるので、医薬品の研究開発のさまざまな場面で Go/No-Go の意思決定に活用できます。ぜひ CLARITY と OFF-X を合わせてご利用下さい。



**CLARITY トライアル受付中**

ご希望の方はお気軽にご連絡ください。



株式会社モルシス  
〒104-0032 東京都中央区八丁堀3丁目19番9号 ジオ八丁堀  
TEL: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031  
E-mail: sales@molsis.co.jp  
<https://www.molsis.co.jp/>

