

ターゲット・作用機序予測プラットフォーム

## Chemotargets CLARITY販売開始



Chemotargets社で開発されたターゲット・作用機序予測プラットフォーム Chemotargets CLARITY (以下、CLARITY)の販売を開始しました。CLARITYは、化合物の構造から有効性や安全性に関わる作用機序の活性、毒性や安全性およびADMEパラメーター全般、代謝物とその薬理学的影響といった広範なプロファイリングを予測します。化合物ライブラリーのバーチャルスクリーニング、標的タンパク質決定後の解析、ドラッグ・リポジショニング、潜在的な毒性や安全性の問題の予測、オフ・ターゲットの相互作用の判別、代謝物に関連する安全性問題の把握などにCLARITYは活用できます。

## ■ Chemotargets社について

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す。同社は2006年にスペインのバルセロナでIMIM Hospital del Mar Medical Research InstituteからDr. Jordi Mestresの研究室がスピノフして設立されました。Chemotargets社は、現在、製薬企業やバイオベンチャーあるいは公的研究機関に予測分析プラットフォームを提供する世界的なリーダーとして認識されています。Prous Institute for Biomedical Researchは、2017年5月にChemotargets社へ戦略的な投資を行い、Chemotargets社の製品開発を促進すると同時に創薬研究のソリューションとしてCLARITYを導入することを決定しました。Chemotargets社は、従来のプラットフォームにProus Institute社の作用機序予測システムPROUS INSTITUTION SYMMETRYとデータ・コンテンツを統合し、最も先進的な予測プラットフォームCLARITYを提供します。

## ■ CLARITYの概要

CLARITYは、化合物の有効性と安全性のプロファイルを解明して作業仮説の立案に役立つ先進的な予測分析プラットフォームです。CLARITYの予測エンジンには、最先端の10種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100万化合物に及ぶトレーニング・セットが搭載されています。10種の計算手法を統合することで高い信頼性が保証されます。個々の予測結果にはコンセンサス・アプローチに基づくスコアが表示されます。大規模なトレーニング・セットによりケミカルスペースが広範囲にカバーされます。トレーニング・セットは定期的に更新され、新しい化合物や作用機序、副作用が追加されます。プラットフォームに搭載された高度な可視化ツールにより予測結果を裏付けるデータを閲覧できます。例えば、リード・アクロスやフラグメント・シグネチャー、構造アラート、オフ・ターゲットなどです。CLARITYはオープン・アーキテクチャーで開発されているので、インハウス・データや独自の計算手法と統合できます。

## ■ CLARITYの特長

CLARITYは、ターゲットとの親和性を予測する6種類の計算手法を搭載しています。Similarity、Similarity

Ensemble Approach、Simplest Active Subgraphs、Local QSAR、Machine Learning、Cross-Pharmacologyの6種です。また、安全性との関連を予測する4種類の計算手法を搭載しています。Ligand-based、Fragment-based、Target-based、Pathway-basedの4種です。さらに、代謝物を予測する知識ベースの計算手法を搭載しています。代謝物のデータベースとして1,791個の異なる基質構造に関連した8,961の代謝的変換を含みます。ターゲットとの親和性の予測や安全性との関連の予測では、個々の予測結果に対して信頼性のスコアとして各計算手法のコンセンサス・スコアが表示されます。

CLARITYのトレーニング・セットの主な情報ソースは、データ・サイエンティストがキュレーションした特許や論文のデータ、共同研究からのデータ、ChEMBLなどの公共データベース、FAERS (FDA Adverse Event Reporting System) データ、Chemotargets社の代謝物データベースです。特許に由来するデータをトレーニング・セットに含んでいることは非常に重要です。トレーニング・セットに特許のデータを含むことで、CLARITYは公共データのみ以外の予測プラットフォームと比較して、より包括的で最新のケミカルスペースに基づいた予測が可能です。

図1はCLARITYの可視化ツールの表示例です。左上にクエリーの構造、右上にリード・アクロスの構造、左下にクエリーやリード・アクロスの物性、右下にターゲットとの親和性の予測結果が表示されています。



図1. CLARITYの解析結果

## ■ ご評価

CLARITYは、無償でトライアル利用できます。ドラッグ・リポジショニングやオフ・ターゲットなどに興味がある方はぜひCLARITYをお試し下さい。トライアルを希望される方は弊社ウェブサイトよりお問い合わせ下さい。