



QEX Suite ver.1.0



化合物の drug likeness “薬らしさ” 評価ツール

<http://www.imsbio.co.jp/products/qexsuite/>

QEX Suiteとは

医薬品候補化合物の効率的なスクリーニングを実現する drug likeness (薬らしさ) 評価ソフトウェアです

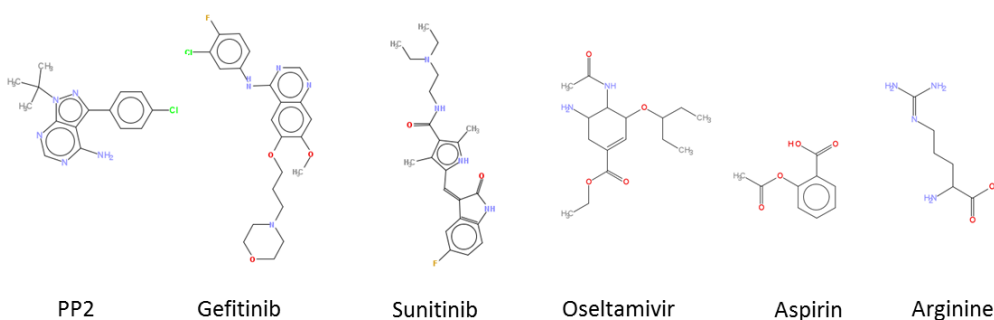
1. 当社グループがIT創薬コンテストで2部門同時受賞した際に使用した技術を商品化しました。
2. ユーザが興味のある任意のターゲットについてモデル作成して drug likenessを 評価します。
3. 2次元構造の SDF / SMILES 形式の化合物データだけから、モデル作成が可能です。3次元構造データは使用しません。
4. チロシンキナーゼSrc阻害剤をターゲットとしたモデルと、QED法相当のモデルが付属しています。
5. ご要望に応じて、秘密保持契約の上、モデル作成のサービスも承ります。

ターゲットに特化した drug likeness 評価の効果

QEX Suite は経口薬を想定した drug likeness 評価手法である QED (quantitative estimate of drug likeness)法 ※ をベースとしていますが、QED法とは異なり任意の化合物セットを用いて評価モデルを構築することができます。従って、特定のターゲットタンパク質の既知阻害剤を用いて構築したモデルを使用すれば、ターゲットに特化したより精密な drug likeness の評価が実現できます。

なお、付属の評価モデルを用いることで、オリジナルの QED に相当する評価も可能です。

Src阻害剤を従来法よりも効率的に分離



阻害活性	○	○	○	×	×	×
特化したスコア	0.75	0.7	0.39	0.26	0.16	0.05
従来法 (QED相当)	0.74	0.51	0.62	0.69	0.55	0.23

※ Quantifying the chemical beauty of drugs, G. Richard Bickerton, Gaia V. Paolini, Jeremy Besnard, Sorel Muresan, Andrew L. Hopkins, Nature Chemistry, Vol. 4, No. 2. (24 January 2012), pp. 90-98, doi:10.1038/nchem.1243

動作環境

機種・OS	Linux 64 bit Mac Intel CPU、OS X 10.10 以上
必要メモリ	4 GB
価格	お問い合わせください。

実装手法の概要

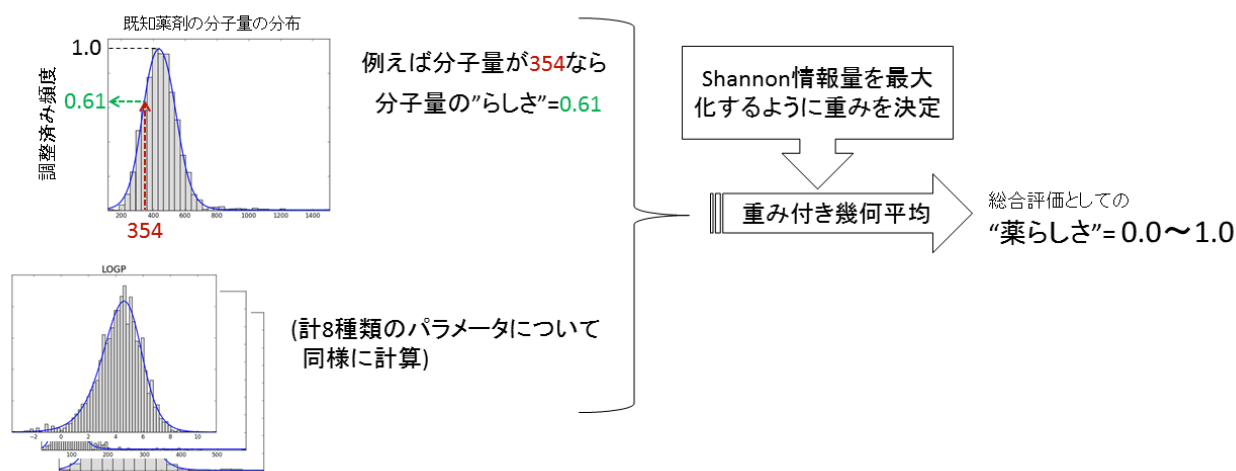
活性化化合物の 2次元のデータセット (SDF / SMILES) だけで評価可能

本手法は、既知薬剤と評価対象化合物の物理化学的パラメータの類似性に基づいてスコアが決定されます。従って、活性化化合物と不活性化化合物の両方のデータセットが訓練に必要な機械学習法とは異なり、不活性化化合物のデータセットの入手が困難な場合でも、適用可能です。

また、化合物の 3次元座標の情報は使用しないため、2次元情報のみの SDF あるいは SMILES が列挙されたテキストファイルからも、モデル構築および評価が可能です。

Drug-likenessスコアの計算アルゴリズム

- 任意の既知薬剤のデータセット(対応形式:SDF, SMILES)からモデルを構築
 - 機械学習と異なり負例(非活性化化合物)は不要
- 0~1の連続値で、化合物を評価



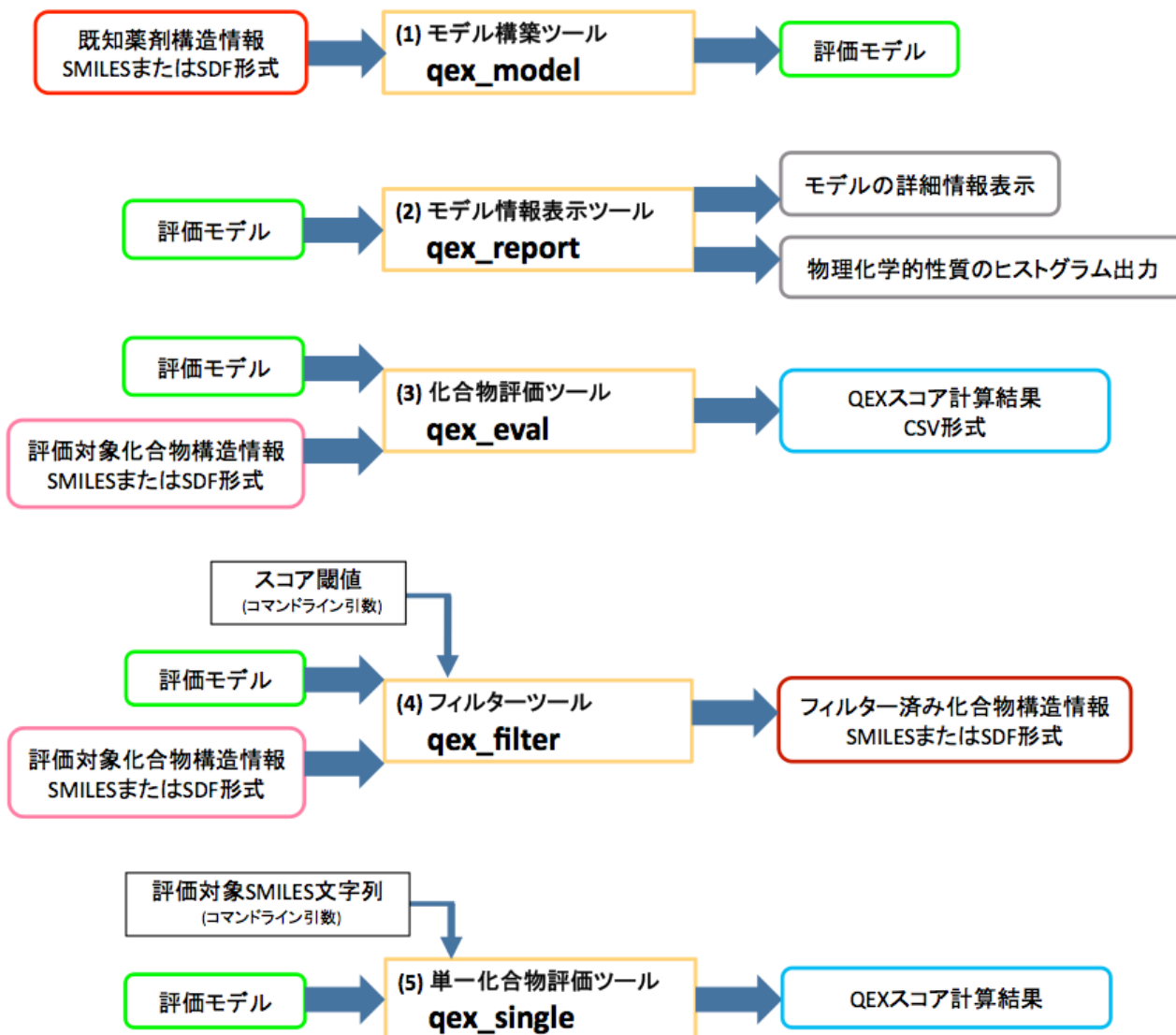
QEX Suite を構成するツールの概要

QEX Suiteは、5種類のCUIプログラムから構成されています。

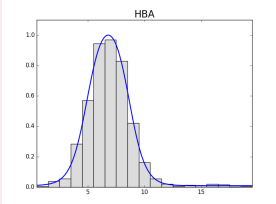
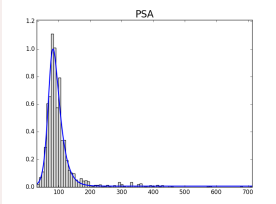
始めに(1)のツールで用途に合ったモデルを構築し、次にこのモデルを用いて(3)、(4)のツールで化合物のスコア評価、スコアに基づく化合物のフィルタリングを行うのが標準的な手順です。

(5)はコマンドライン引数にSMILES文字列を指定することで、簡易的に単一化合物を評価する際に用います。

QEX Suiteに含まれる各種ツールの入出力



QEX Suite 機能一覧

機能	入力	出力
qex_model モデル構築	SDF/SMILES	<ul style="list-style-type: none"> ターゲットタンパク質の既知阻害剤らしさの評価モデルファイル
qex_report モデルの情報表示	評価モデル	<ul style="list-style-type: none"> 8種類の物理化学的特性の分布にフィッティングされた関数の係数 各特性値のヒストグラムとフィッティングされた関数の図 (PNG) <p>【例】</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around;">   </div> <ul style="list-style-type: none"> フィッティングの精度を示すピアソンの積率相関係数 各関数が最大値となる特性値。つまり、最もdrug-likenessな特性値 最終的な評価値を計算する際に、各特性値のスコアに負荷される重み
qex_eval 評価結果のCSV出力	評価モデル SDF/SMILES	<ul style="list-style-type: none"> 各化合物のQEX値を含むCSVファイル <p>【例】 出力に chembl_id 指定時の例</p> <pre>ID,QEX,chembl_id CHEMBL238220,0.44561955992365004,CHEMBL238220 CHEMBL3444168,0.17799025268044233,CHEMBL3444168 CHEMBL400787,0.3934981822690704,CHEMBL400787 :</pre>
qex_filter 化合物のスクリーニング	評価モデル SDF/SMILES しきい値	<ul style="list-style-type: none"> しきい値以上のQEX値を示す化合物のみのSDF/SMILESファイル
qex_single 単一化合物の評価	評価モデル SMILE文字列	<ul style="list-style-type: none"> 単一化合物のQEX値

詳しくは、QEX Suite のホームページをご覧ください <http://www.imsbio.co.jp/products/qexsuite/>



株式会社 情報数理バイオ

○お問合せ先 (株)情報数理バイオ 営業部
〒170-0013 東京都豊島区東池袋4-21-1 アウルタワー6F
TEL 03-6907-0315 FAX 03-6907-0316
EMAIL: info@imsbio.co.jp URL: <http://www.imsbio.co.jp>