

# インシリコ(計算)毒性学 総合コンサルティング

## 業務内容

1. システム関連
  - ・システム構築支援
  - ・予測モデル構築支援
2. 研究支援関連
  - ・データ解析支援
  - ・教育支援
  - ・研究支援

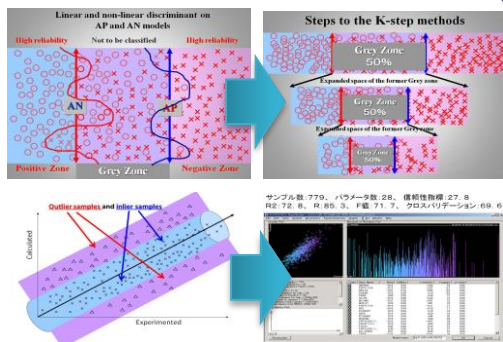
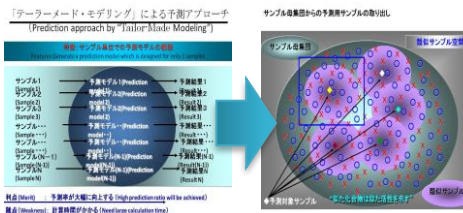
## 技術協力作業／他

1. システム関連
  - 協力・支援作業
  - ・ACD／Percepta
  - ・ADMEWORKS
2. その他
  - ・学会発表
  - ・研究会、学会等活動

## 独自保有／提案技術

1. データ解析関連
  - ・ **KY(K-step Yard sampling)法**
    - ◆ 毒性評価／予測に特化した新規で強力なデータ解析手法
    - ◆ 常に完全分類達成：ニクラス分類 極めて高いR/R<sup>2</sup>値：重回帰
    - ◆ ニクラス分類：3種類 重回帰：3種類 (JP, EU, USA 特許化、出願済み)
    - ◆ 関連手法：KYクラスタリング、KYPC

- ・ **テーラーメイド・モデリング**
  - ◆ 化合物の類似特性を利用
  - ◆ 予測対象化合物単位でリサンプリングと予測モデル構築
  - ◆ サンプル数フリー予測率 (JP, EU, USA 特許化、出願済み)



2. その他の開発／提案技術
  - ・SARD(3-D QSAR手法)
  - ・超球法(データ解析手法)
  - ・リード化合物検索
  - ・リード化合物再構築
  - ・インテグレートド概念
  - ・インシリコンビ概念
  - ・並列創薬
  - ・他

## 計算毒性学研究会

日本最初の「**計算毒性学**」をターゲットとした研究会

## CBI学会

CBI学会傘下の組織

## 計算毒性学研究会

(Computational Toxicology)

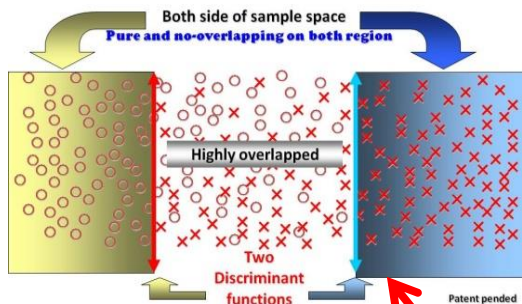
## 入会手続き

CBI学会非会員参加可  
入会／年会費無料

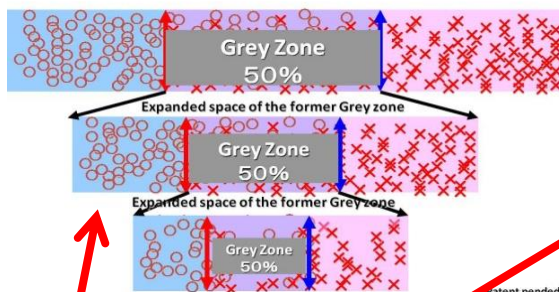
資料／参加申し込み書



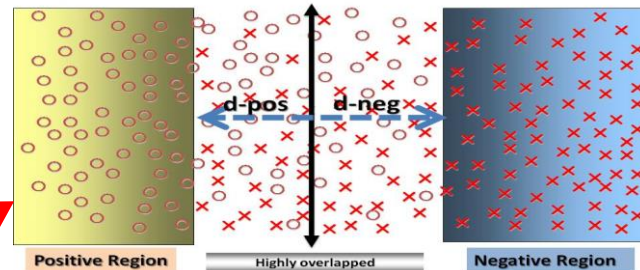
## First basic concept of KY method Spatial region on sample space



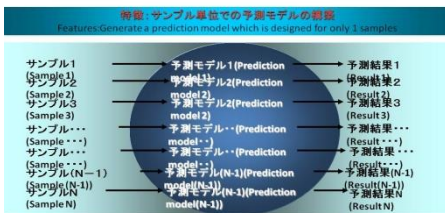
## Second basic concept of KY method Multi-steps for 100% classification



## New approach to the "KY method" by one discriminant function

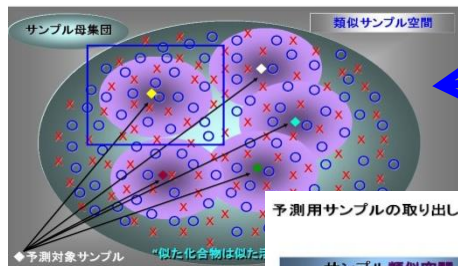


「テーラーメイド・モデリング」による予測アプローチ  
(Prediction approach by "Tailor-Made Modeling")

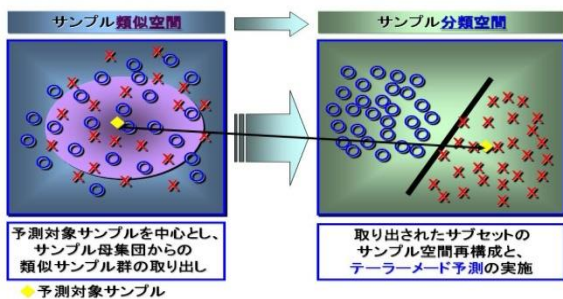


利点 (Merit) : 予測率が大幅に向上する (High prediction ratio will be achieved)  
 難点 (Weakness): 計算時間がかかる (Need large calculation time)

サンプル母集団からの予測用サンプルの取り出し



予測用サンプルの取り出しと、テーラーメイド予測



## A series of KY methods

Discriminant Analysis	Fitting
Two model KY	KY Fitting with DA
Single model KY	KY Fitting with no DA
Model free KY	Model free KY Fitting

\*Always carry perfect classification

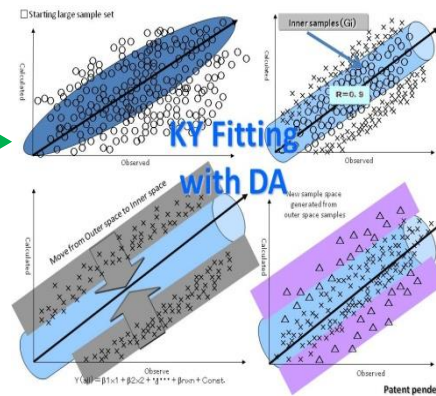
\*Always high coefficient of determination

Discriminant Analysis	Fitting
Tailor-made Modeling for DA	Tailor-made Modeling for Fitting

\*Always carry high prediction ratio

All methods were Patent Pending

In Silico Data  
Miracled by the KY-methods

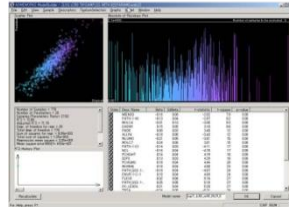


◆KY method for fitting methods (Will be soon coming)

Fish 95 hours LCD. Number of samples: 791. Log(LCD), Min (Max/Mix): 4.376 / 2.963

◆Data analysis by ordinal linear regression

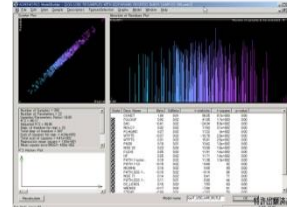
Step1: Inner sample set  
 Number of samples: 779. Number of used parameters: 28. Confidence ratio: 27.8  
 R2: 72.8, R: 85.1, F-value: 71.7, CV: 69.6



◆フィッティングKY法実証実験 (2)

◆フィッティングKY法による解析 (ステージ1)

ステップ1: インナーサンプル  
 サンプル数: 306, パラメータ数: 22, 信頼性指標: 18.1  
 R2: 96.2, R: 98.1, F値: 428, クロスバリデーション: 94.4



◆フィッティングKY法実証実験 (3)

◆フィッティングKY法による解析 (ステージ1)

ステージ1: アウターサンプル  
 サンプル数: 393, パラメータ数: 29, 信頼性指標: 13.6  
 R2: 64.7, R: 80.4, F値: 22.9, クロスバリデーション: 67.5

