

Data Management and Decision Support

Leadscope® Enterprise

Leadscope® は27,000個以上ものフラグメントキーに基づいた化合物分類を行い、構造的特徴と読込んだ活性値や自動計算される物性・プロパティ値に対する相関をグラフィカルに表示することで、データマイニング・意思決定支援のための有効なツールとなります。

機能

- 大規模な公共データまたは自社独自のコンテンツへのアクセス
- ロード可能な化合物数は無制限
- 化学構造に対する様々な手法による分類：
 - 27,000個以上もの medicinal chemistry building blocks に基づいた分類
 - Recursive Partitioning with Simulated Annealing (RPSA) 法を用いた活性化合物クラスの特定
 - 構造の類似性に基づいたクラスタリング
 - 重要な共通部分構造または骨格の特定
- R-Group 解析
- サブセットの抽出 (Similar, Dissimilar)
- 構造検索機能 (部分構造または類似構造検索)
- 構造と活性等に対する相関関係のカラーグラフィカル表示
- プロパティ計算機能 (aLogP・PSA・Lipinski score等)



Chemical Hierarchyによる化合物の分類

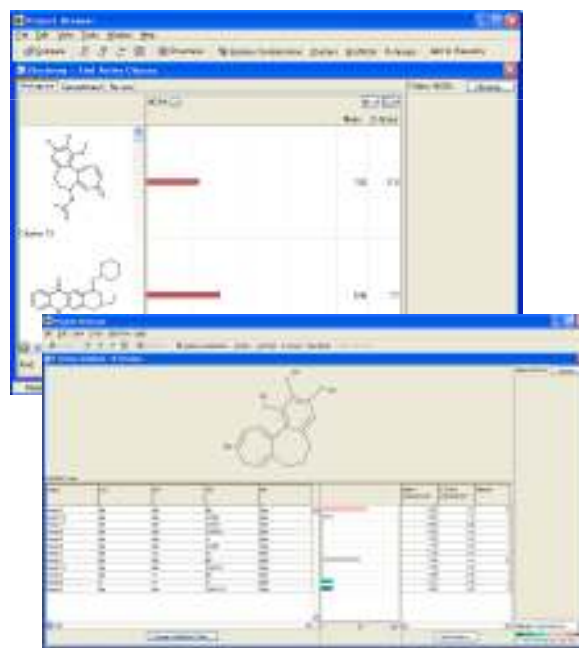
稼動環境

<クライアント>

OS : Windows XP, Vista or Windows 7
 CPU : Pentium 4, 1.0GHz processor (or equivalent)
 RAM : 1GB 以上
 ハードディスク : 1GB 以上

<サーバー>

OS : Linux – RedHat Enterprise, Solaris 8+, Windows XP professional + Cygwin
 CPU : Dual 1GHz 以上
 RAM : 2GB 以上
 ハードディスク : 100GB 以上
 データベース : Oracle 9i または10g



活性クラスとR-Groupテーブル