

Data Management and Decision Support

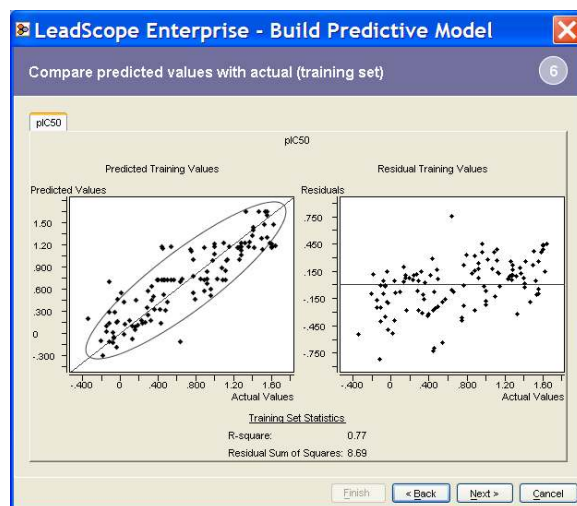
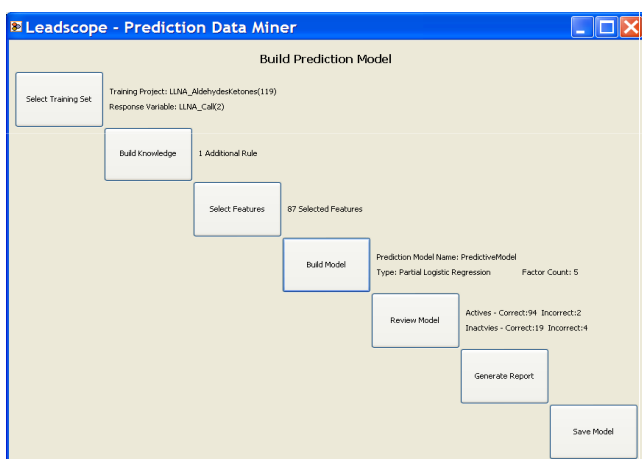
Leadscope® Predictive Data Miner

Leadscope Predictive Data Miner は、フラグメントキー、プロパティを用いたQSARモデルの構築とQSARモデルによる新規化合物の活性・毒性予測を行なうLeadscopeのオプションモジュールです。Domainを考慮したデータ選択・モデル適用が可能です。

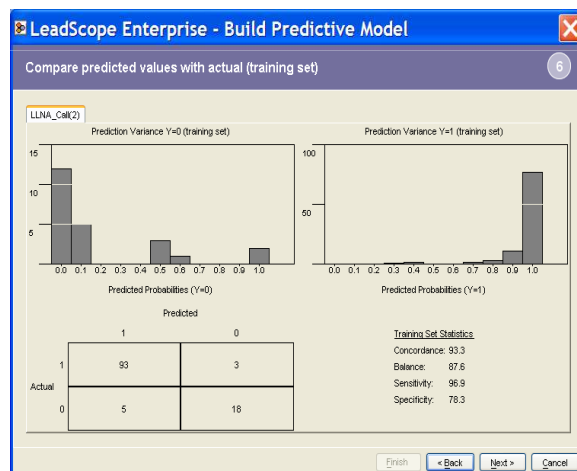
機能

- ・ トレーニングセットの構築
- ・ サブセットデータの作成
- ・ トレーニングセットDomainの確認と比較
- ・ 予測モデルの構築とモデルDomainの特定
- ・ 専門知識またはソフトウェアで学習したルールの追加
- ・ フラグメントキー、プロパティからディスクリプタの選択
- ・ PLS およびPLR (partial logistic regression)モデルの作成機能
- ・ クロスバリデーション(Leave One out, 20-fold, 10-fold etc.)
- ・ 新規化合物へのモデル適用時にモデルDomain適合性を解析
- ・ OECDガイドラインに準拠

<モデル作成フロー>



Review Model: continuous value prediction



Review Model: categorical value prediction

Requirements

Leadscope® Enterprise または Leadscope® Personal