

Data Management and Decision Support

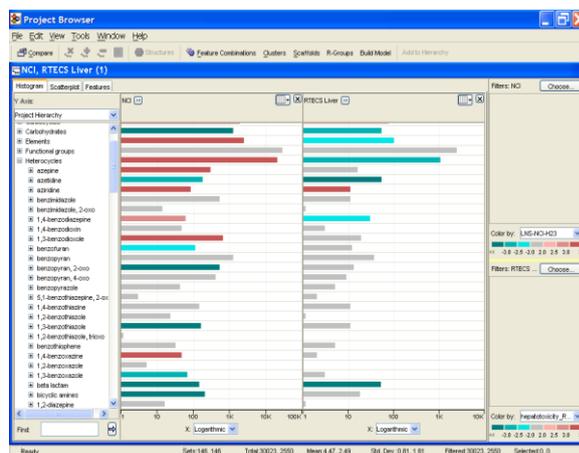
Leadscope® Enterprise



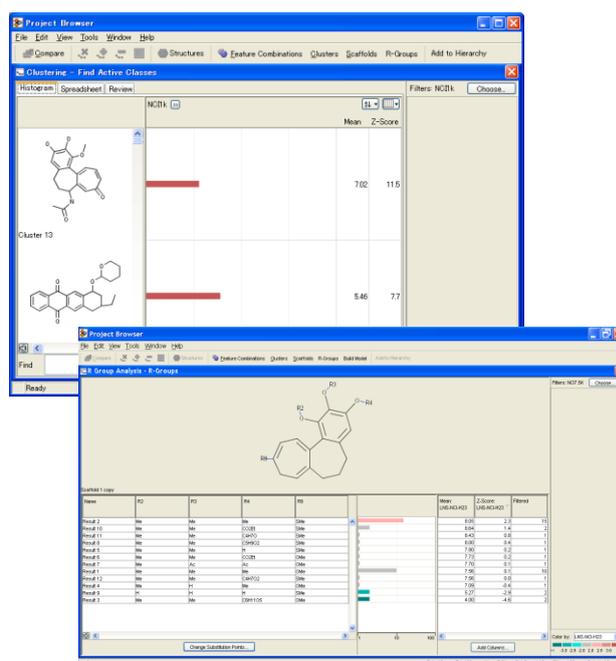
Leadscope® は27,000個以上ものフラグメントキーに基づいた化合物分類を行い構造的特徴と読込んだ活性値や自動計算される物性・プロパティ値に対する相関をグラフィカルに表示することで、データマイニング・意思決定支援のための有効なツールとなります。

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ーリング
 - 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



活性クラスとR-Groupテーブル

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