

表 Drug Discoveryに直接関わる情報計算技法の分類

標的の探索

分子生物学的な手法による疾病メカニズムの解明: IT for Life Science
疾病関連遺伝子の探索: 配列の比較、連鎖解析、SNP s、Haplotyping
ゲノム配列中の標的類似遺伝子の探索: 既知標的遺伝子による類似検索
標的候補タンパク質の探索
遺伝子が増えているタンパク質の探索
疾患における変異タンパク質の同定
治療薬の標的になりうるタンパク質 Drugable Targetの探索
標的タンパク質の構造解析: 全体構造と標的部位の構造解析
タンパク質の立体構造推定: Protein folding, Protein modeling

Lead化合物の探索

化合物Library: DatabaseとAssay Sample (数十万 ~ 数百万化合物)
Combinatorial chemistry, Natural products
Focused Library: 特定標的タンパク質に結合する化合物 (数百化合物)
Chemical Genomics: Pathway/Network modulatorのデータベース
Drug and candidate Databaseを用いたDrugness/Drugability analysis
High Throughput Screening: High Throughput binding assay
Virtual Screening: Computer docking simulation

From lead candidates to lead

-omics実験
Pathway/Network解析
Lead refinement: Improving potency
ADME/Tox: ComputerによるADME/Toxの推定法

Candidate to Drug

Clinical trial: 患者特性と統計学を基礎とした治験計画と解析
Post-Clinical-Trial Matter: 治験結果と判断
Post Marketing Follow Up: 副作用、相互作用の監視と解析