

候補分子の優先順位づけを目的として Flare™で活性値予測モデルを構築する

よい QSAR モデルを構築することができれば、新規化合物の活性と ADMET 特性を予測し、
合成が望まれる薬候補分子の優先順位をつけて絞り込むことができます。
本 Webinar では以下の内容を紹介します。

- * SAR の定量的回帰および分類モデルを構築する
- * 複数のモデルを構築し、比較・選択します
- * Field QSAR モデルの解釈をします
- * 構築されたモデルに基づき新規化合物の活性を予測します

日時

2021 年 9 月 15 日 9am BST (日本時間 9 月 15 日午後 5 時)

講演時間 45 分

ご聴講には事前登録が必要です。以下の URL にてご登録ください。

<https://www.cresset-group.com/about/events/qsar-flare/>

※ I will attend the webinar on の項目で上記の開催時刻をご選択ください。

講師 Giovanna Tedesco

Giovanna Tedesco は Padova 大学で生物学を修了し、
20 年間 Glaxo/Glaxo Wellcome/GSK で上級計算化学者として
抗菌薬や中枢神経領域の様々な創薬研究やリードジェネレー
ションに携わる。

その後 Aptuit 社(現 Evotec)のシニアポポーザルドライバーとして事業開発を推進。

2014 年 12 月 Cresset 社に加わり、現在に至り、計算化学者
および創薬研究者向けの Cresset デスクトップソリューションの責任者を務める。



共催

Cresset BIOSPIRE