

Excelra Knowledge Solutions Pvt Ltd

10.02.2022 - 12:02 Uhr

X-Chem und GOSTAR von Excelra schließen sich zusammen, um die Entdeckung von Medikamenten für schwierige Targets voranzutreiben

London und Hyderabad, Indien (ots/PRNewswire) -

Eine neue Zusammenarbeit zwischen dem führenden Unternehmen für Datenwissenschaft und -analyse, Excelra, und dem Pionier für künstliche Intelligenz, X-Chem, wird die präklinische Arzneimittelentdeckung beschleunigen und Wissenschaftlern dabei helfen, neue Arzneimittelkandidaten für derzeit schwer zu behandelnde Zielmoleküle zu finden.

Maschinelles Lernen und künstliche Intelligenz unterstützen die Entdeckung und Optimierung von Arzneimittelkandidaten. Diese synergetische neue Partnerschaft zwischen GOSTAR von Excelra und RosalindAI von X-Chem wird einzigartige und leistungsstarke Werkzeuge zur Vorhersage kleiner Moleküle, chemischer, biologischer und physikalischer Eigenschaften ermöglichen und damit die zeit- und ressourcenintensiven Phasen der Arzneimittelentdeckung von der Treffer-Identifizierung bis zur Auswahl präklinischer Kandidaten beschleunigen.

„Dies ist eine perfekte Verbindung zwischen zwei der besten Lösungen für einige schwierige Herausforderungen in der Arzneimittelforschung“, erklärte Norman Azoulay, Director, Scientific Products. „Wir sind überzeugt, dass diese Partnerschaft den Arzneimittelentwicklern helfen wird, ihre Pipelines besser zu unterstützen.“

GOSTARs proprietärer Datensatz wurde in einer [kürzlich durchgeführten Studie](#) einer rigorosen Analyse und einer groß angelegten ML-Modellbildung zur Vorhersage der Löslichkeit von Medikamenten unterzogen. Die RosalindAI von X-Chem lieferte umsetzbare und bessere Ergebnisse als andere ähnliche Analysen mit bekannten, öffentlich zugänglichen Datensätzen. Die Ergebnisse bestätigten, dass die proprietären Modelle von RosalindAI speziell für die Herausforderungen chemischer Datensätze entwickelt wurden. Als die Modelle mit den größeren, vielfältigeren GOSTAR-Daten trainiert wurden, waren sie doppelt so gut wie die Modelle, die mit anderen Datensätzen trainiert wurden.

X-Chem SVP Noor Shaker erläutert: „RosalindAI ist führend im Einsatz von KI-Tools, die präzise, skalierbar und robust sind und einen Wandel in der präklinischen Wirkstoffforschung ermöglichen. Unsere Zusammenarbeit mit Excelra wird es uns ermöglichen, GOSTAR-Daten und auch KI in einer Weise zu nutzen, wie es bisher nicht möglich war.“

GOSTAR bietet einen einzigartigen 360°-Blick auf über 8 Millionen kleine Moleküle. Die Inhalte in GOSTAR werden mit einem proprietären QMS-ISO-zertifizierten Prozess sorgfältig kuratiert. Er bietet den aktuellsten Überblick über den chemischen Raum mit Informationen über chemische Strukturen und ihre biologischen Eigenschaften, einschließlich Bindung, in-vitro, in-vivo, ADME, Tox und physikochemische Eigenschaften.

RosalindAI von X-Chem ist eine führende KI-Plattform für die präklinische Arzneimittelforschung und bietet eine nahtlose Schnittstelle zur Erstellung erstklassiger KI-Modelle für chemisches Design und Optimierung. Außerdem wurde sie auch erfolgreich für die Entwicklung eines neuen Chemotyps für anspruchsvolle Targets und für die genaue Vorhersage von chemischen Aktivitäten und Eigenschaften eingesetzt.

Informationen zu Excelra und GOSTAR

Die Daten- und Analyselösungen von Excelra unterstützen die Innovation in den Biowissenschaften vom Molekül bis zum Markt. Der Excelra Edge basiert auf der Harmonisierung heterogener Datensätze und der Anwendung von innovativem bioinformatischem Know-how und Technologien, um die Entdeckung und Entwicklung von Arzneimitteln mit zuverlässigen und ergebnisorientierten Erkenntnissen zu beschleunigen. Excelras GOSTAR ist eine Anwendung, die den Nutzer hilft, Verbindungen zu suchen, zu finden und zu entdecken. Darüber hinaus wird es über APIs und als herunterladbarer Datensatz angeboten, um interne Bibliotheken und maschinelle Lernmodelle zu unterstützen.

Weitere Informationen zu GOSTAR finden Sie unter <https://www.gostardb.com/>

Informationen zu X-Chem

X-Chem ist ein führender Anbieter von Dienstleistungen im Bereich der Entdeckung kleiner Moleküle für Pharma- und Biotech-Unternehmen. Als Pionier der DNA-codierten chemischen Bibliothekstechnologie (DEL) nutzt das Unternehmen seine marktführende DEL-Plattform zur Entdeckung neuartiger niedermolekularer Wirkstoffe gegen anspruchsvolle, hochwertige therapeutische Targets. Mit seiner branchenführenden Expertise in der medizinischen Chemie, der Auftragsynthese und der Scale-up-Prozesschemie sowie einer proprietären KI-Plattform zur Unterstützung und Beschleunigung aller Aspekte der Arzneimittelforschung unterstützt X-Chem seine Partner beim effektiven Aufbau von Arzneimittelpipelines vom Target bis zum klinischen Kandidaten. Weitere Informationen finden Sie unter <https://www.x-chemrx.com/>.

Presseanfragen richten Sie bitte an:

Jigesh Shah

Jigesh.shah@excelra.com

Noor Shaker

noor@glamorous.ai

Logo: https://mma.prnewswire.com/media/692189/Excelra_Logo.jpg

Pressekontakt:

+91 9820444994

Diese Meldung kann unter <https://www.presseportal.ch/de/pm/100071145/100885005> abgerufen werden.