



## 創薬研究情報共有クラウドシステム

# CDD Vault のご紹介

情報計算化学生物学会 2015 年大会 ランチョンセミナー

日時：2015 年 10 月 28 日(水) 11:30 – 13:00

会場：タワーホール船堀 4 階研修室



株式会社  
菱化システム

岡崎 泰典

株式会社菱化システム 科学技術システム事業部 データサイエンス部



Dr. Barry A. Bunin

CEO and Board Director, Collaborative Drug Discovery, Inc.

近年、製薬企業、バイオベンチャー、公的研究機関、大学など複数の研究機関からなる共同研究プロジェクトが立ち上げられるようになってきています。こうしたプロジェクトに参加している研究チームは各々の施設で研究業務を遂行するため、データをどのようにプロジェクトメンバーに対して共有し、活用していくのが課題の 1 つとなっています。言い換えれば効果的なデータの活用がプロジェクトの進行を左右する要因になり得ます。

またこうした複数の研究機関から構成されるプロジェクトに限らず、社外のグループと共同研究を行っているケースは数多く見受けられ、やはりデータの共有が同様に課題になっています。

一方で一般業務においてデータの管理・共有にクラウドストレージやクラウドサービスが活用されるようになっており、欧米を中心に R&D 分野での利用も浸透してきています。

Collaborative Drug Discovery 社の CDD Vault は創薬分野における共同研究のデータを扱うために設計されたクラウドサービスで、構造情報を含む化合物データをはじめ、アッセイプロトコルの管理、アッセイ結果の可視化など医薬品候補化合物に対する評価に必要とされる機能が Web ブラウザーのみで利用できます。クラウドサービスであるため、IT 管理者を置く必要が無く、固定資産となるサーバーハードウェアを必要としません。また必要な期間だけの利用ができますので、プロジェクトの遂行期間に合わせてお使いいただけます。

今回は CDD Vault が提供する機能を、デモンストレーションを交えながら紹介致します。併せて、活用事例やセキュリティについても紹介致します。

## 研究データの管理および解析

各分野の研究者による共同研究の効果を高められる“場”の提供により、有効な化合物の発見を促進します。

### 化合物

ChemAxon 社のエンジンにより、構造検索や各種記述子の算出が可能です。

- ▶ SMILES、InChi、MOL、IUPAC 名をサポート
- ▶ SDF、CSV ファイルからの化合物情報登録
- ▶ Web ブラウザー内で動作する構造描画ツール
- ▶ 構造情報からの Lipinski ルール、logP、pKa などの記述子を算出
- ▶ 部分構造検索、類似構造検索、R-グループ検索



### バイオアッセイ

直観的なウィザードにより、データ量やファイル形式に応じたデータインポートをサポートします。計算式を組み込んだ任意のプロトコルを設定できます。

- ▶ 活性評価、PK/PD、ADME、毒性試験など幅広いプロトコルに対応
- ▶ EC50/IC50、EC90、MIC の算出
- ▶ HTS プレートの QC、ヒートマップ、Z/Z'ファクター、Zスコア計算

### データマイニング

SAR 解析やヒートマップなど様々なデータマイニングを、プラグインや外部アプリケーションを利用することなく行えます。

- ▶ SAR テーブルやヒートマップなど目的に応じた評価法の利用
- ▶ ROC 曲線によるスクリーニングモデルの評価
- ▶ サーバーサイド処理による高速な演算

## パブリックデータと組み合わせた評価

自分たちのデータと CDD Vault 内で利用できる各種パブリックデータを組み合わせた、データマイニングやスクリーニングモデルの評価を行えます。

### スクリーニングデータ

ChEMBL (GPCR、Malaria、Kinase)や FDA repurposed drug、NIH MLSMR、GlaxoSmithKline 社 TCAMs に代表される、数百のパブリックソースの HTS/LTS データを利用できます。

### 化合物情報

構造式や生物活性データ、毒性情報、論文の参照情報が付随した 200 万以上の化合物情報を利用できます。

## セキュリティ

CDD 社で専用のデータセンターを保有、運用することにより、お客様の大切なデータを強固に管理します。2004 年以降のシステムの稼働率は 99.98% であり、高い安定性を維持しています。

- ▶ IP アドレスによる制限
- ▶ パスワードによる個別認証
- ▶ 二段階認証
- ▶ HTTPS により暗号化された安全な Web 通信
- ▶ データやファイルは暗号化されて保存
- ▶ リモートサーバーに暗号化されたバックアップを毎日保存