

情報計算法学生物学会 2018 年大会 ドットマティクス日本支店 ランチョンセミナー

クラウド及びオンプレミス共通型次世代創薬基盤システム

「低分子・ペプチド・核酸・抗体医薬品に対応した次世代創薬基盤システムを紹介します」

日時:2018 年 10 月 10 日(水) 11:30~13:00 4F 研修室

多くの製薬会社では各種実験装置や既存アプリケーションシステム間との連携が必要なことから、創薬研究情報管理システムを社内ネットワーク内に構築することが通常である。セキュリティ対策面でもオンプレミス環境がまだまだ一般的であり、そのニーズは非常に高い。その一方で、社外の共同研究者や CRO との協業が増え、如何に高いセキュリティを保ったままスピーディに効率よく共同研究を遂行できるかが生き残りをかけた最重要課題となってきた。

また、今までの低分子創薬を継続しつつ新規の創薬研究(ペプチド・核酸・抗体)も進めようとしたところ、既存の低分子化合物を対象に設計された創薬研究情報管理システムでは新規の創薬研究で生み出されたデータを効率よくハンドリング出来ない課題に直面している。

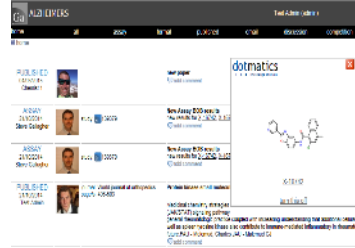
大手の製薬会社はこぞって電子実験ノートを導入したが複雑にカスタマイズされたクライアント-サーバ型の製品を利用して来た為に、多額のバージョンアップ費用とランニングコストが創薬研究費を押し上げており、その対応策をマネジメント層から要望されている状況と思われる。

弊社は多くの製薬会社で抱えているこれら課題に関し、クラウド及びオンプレミス共通型次世代創薬基盤システムを利用することで下記の通り具体的なソリューションを提案し、日本の製薬会社様に導入実績を増やし続けております。

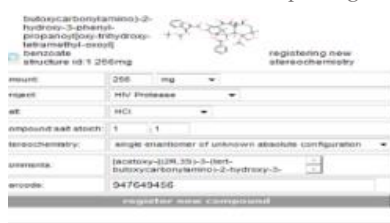
1. 弊社の Browser 統合・参照 Web ブラウザは各社の化合物構造式オラクルカードリッジ(BIOVIA Direct、ChemAxon JChem、PerkinElmer CS Cartridge)と連携することで既存のアプリケーションと連携することが可能となっている。勿論、ChemDraw 及び BIOVIA Draw も利用可能。
2. 弊社の製品群は電子実験ノートを含めて Web アプリケーションベースで構成されており、社外との共同研究および CRO との協業(クラウド)や、社内システム(オンプレミス)のいずれのシチュエーションにも同一の製品で対応。
3. 弊社の Register は低分子化合物から数百までのペプチド(天然・非天然)を取り扱え、ChemDraw を利用することで配列形式(天然アミノ酸)での登録が可能。Bioregister ではペプチド・核酸・抗体などの配列情報を非天然モノマーの管理を含めて取り扱う事が可能。
4. 弊社は HTS/HCS スクリーニング用として Studies を、LTS/マニュアルアッセイには Studies Notebook/Nucleus を組み合わせることでアッセイデータを比較的簡単にオラクルデータベース化することが可能。
5. 弊社の製品群は全てワンプラットフォームで開発され Tomcat サーバでファイルを差し替えるだけでバージョンアップが完了。当然、全てのユーザの検索画面・クエリや管理者情報も引き継がれます。

今回のランチョンセミナーでは、ドットマティクス製品群が低分子や高分子創薬、化学、製剤化等のいずれの業務エリアでも、科学的データの検索と分析に十分な化学的知見と生物学的知見を持っていることを紹介します。具体的には、Browser は、化学データベースに関する化学構造検索の結果とアッセイ結果を連係させ、解析用のデータセットを素早く収集し、計算された化学的特性を実験データとともに検索・表示することを紹介。Vortex は、R グループ分析、化学クラスタリング、MMP(matched molecular pairs)の組み合わせなどの豊富な化学情報の計算と解析ツールを提供し、2D-SAR(Structure-Activity Relationship)などのプロットを使用して結果を表示します。ChemSelector は、非常に大きな化学データセットを超高速度に検索できる他、独自のフラグメントベース検索が可能です。これらドットマティクス製品群が非常に柔軟性を持ってシームレスに統合され、研究全体の意思決定に必要な時間を大幅に短縮する方法について説明します。

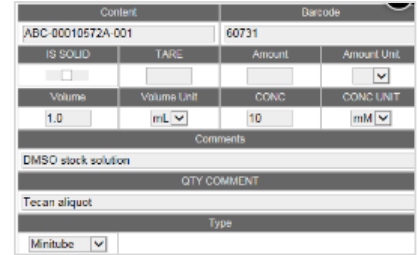
Ga ドキュメント管理システム
Document management & sharing



Re 化合物登録管理システム
Chemical & sample registration



In 化合物・抗体インベントリー
Chemicals & biologicals inventory



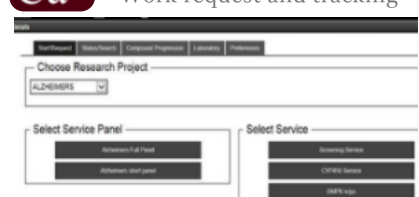
Rw 低分子反応・設計ツール
Reaction Work Flow



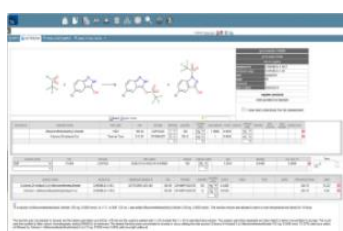
Bi 抗体・核酸登録管理システム
Biologicals registration & management



Ca 業務依頼・進捗管理システム
Work request and tracking



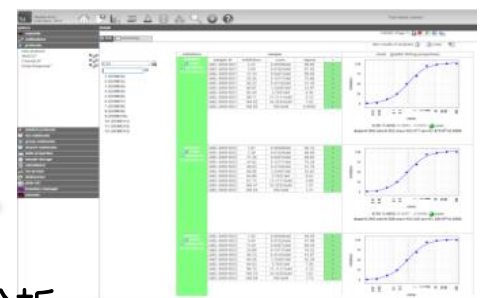
Stⁿ ケミカル・バイオ電子実験ノート
ELN for all



作る

テスト

St HTS/HCS スクリーニング管理システム
HTS & HCS screening management



Br ダイナミック・ブラウザー
Data federation, query and reporting



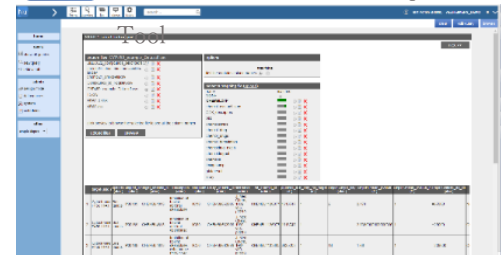
設計

分析

Ch 超高速試薬データベース
ChemSelector/eMolecule



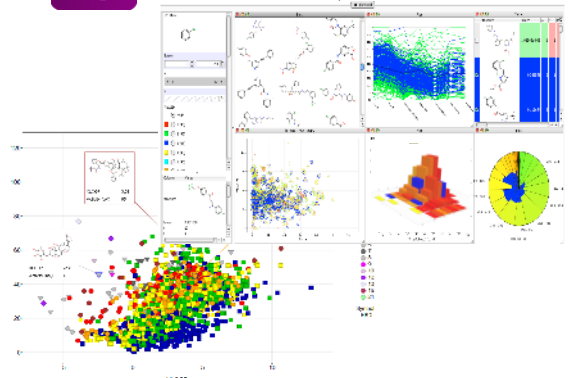
Nu LTS アッセイアップロードツール
Excel / CSV / SD file DB Upload



D₄O MS Office アドイン
Microsoft® Office add-in

Lead compounds			
ID	X-10023,X-10029	X-10024,X-10028	X-10027,X-10027
mw (PSA Mod)	416.46 104 2.87	316.76 58 4.82	390.43 31.1 5.80
AS IC50 (uM)	AS IC50 (uM) 1164.69 uM	AS IC50 (uM) 827.79 uM	AS IC50 (uM) 202.05 uM
PK	76.365	78.295	81.49

Vo 超高速・多次元解析ツール
Interactive analytics & visualisation



ドットマティクス日本支店

〒105-0004

東京都港区新橋 4-21-3 新橋東急ビル 3 階

電話: 03-6895-7390

Mail: jp_sales@dotmatics.com

