

ランチョンセミナー 10月26日(水) 12:00~ 2階<福寿>

①DMTAサイクルを同一プラットフォームで Design Hub

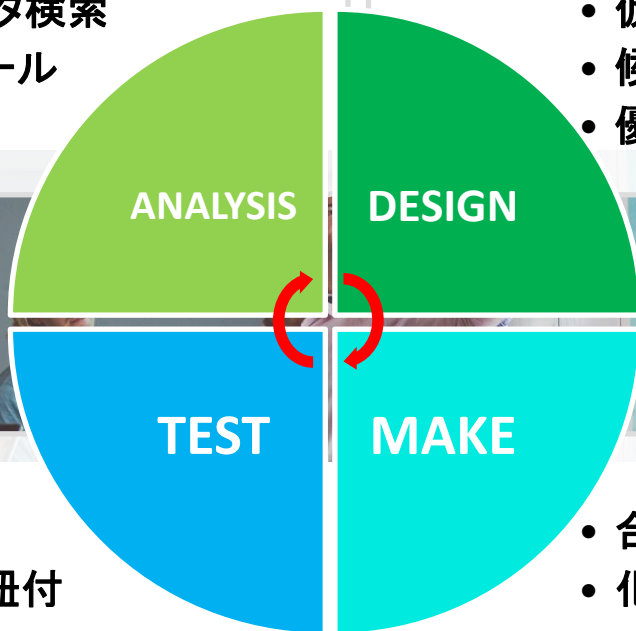
Design Hubは、創薬プロジェクトにおいて必要なデータを一か所にまとめ、データに基づく意思決定を容易に行えるようにした「化合物デザインの間」を提供するものです。

創薬は、Design、Make、Test、Analyzeといった、いわゆるDMTAサイクルを回して進められますが、DesignHubはこのDMTAサイクル全体を情報面から支援します。

今回のセミナーでは、化合物のデザインとCROとの共創における作業追跡の利用例などを含めた実用例を中心にご紹介いたします。

- プロジェクトデータ検索
- 視覚化・分析ツール
- 仮想化合物生成

- 仮説の展開
- 候補化合物の設計
- 優先順位付け



- 生物学的テスト
- 評価データとの紐付

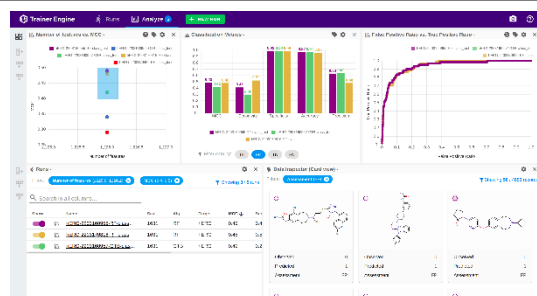
- 合成進捗管理
- 化合物登録連携
- CRO連携

②機械学習・予測ワークフローを効率化！ Trainer Engine



組織規模で効率的に機械学習の取り組みのルーチン化を実現！

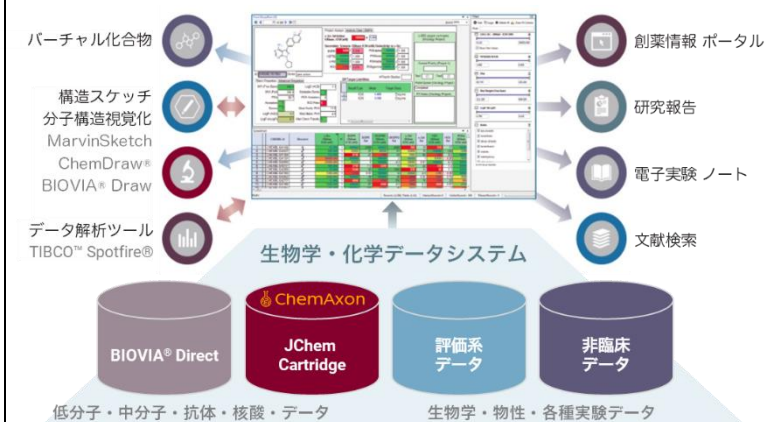
- データの取り込み~検証済みモデルの組織内展開までカバー
- 構造式の標準化と高品質でカスタマイズ可能な記述子を利用
- モデル最適化のための豊富なフィードバックと可視化
- センtralモデルリポジトリで採用モデルの選定を支援内蔵のグラフィカルインターフェース、Design Hub、その他のデザインプラットフォームから予測機能にアクセス可能
- 生物活性、ADMET、物理化学的性質の予測が可能



散在したデータを見える化する D360™

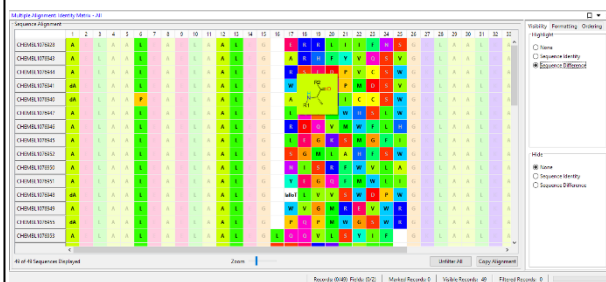
直感的な操作性で欲しい情報へアクセス

D360™は直感的な操作でご使用いただけますので、データアクセスや解析を研究者自身で自由に進めることができます。マウスをクリックするだけで必要な情報を抽出する為の条件を設定し、検索を実行できます。データの保管状況に関わらず、解析に必要な形式でデータを抽出して、変換や表示が可能です。



多様なモダリティへの対応

今日の創薬プロジェクトでは、低分子化合物だけでなく、抗体、ペプチド、ADCといった生物製剤など、多様なモダリティを治療手段として評価します。D360™は、低分子、生物製剤、さらに前臨床トランスレーションに対応。
 ✓ オリゴヌクレオチド、ペプチド、抗体、ADCなどの配列アライメント
 ✓ HELM言語に従った、検索、フィルタリング、類似性の計算
 ✓ バイオポリマーの配列-構造活性相関 など



化学物質適正管理ソリューション

安全で適法な研究推進をより確実・簡単に！

- 頻繁に改正される規制法令等を迅速にオペレーションに反映
- 主要試薬ベンダーの最新統合カタログで試薬の購買・適正管理を実施
- 試薬の発注～廃棄までを適法・簡単・効率的に

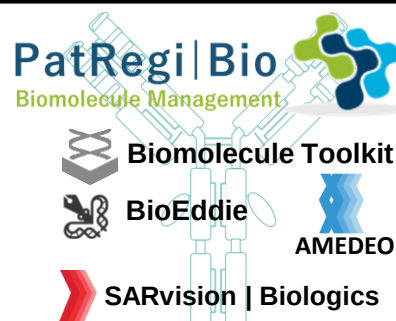
COMPLIANCE

CRAIS Checker
SMARTS
CRAIS Reagent

バイオモダリティ情報プラットフォーム

複雑なバイオ分子をHELMネイティブなプラットフォームで確実に管理

- ADCや化学修飾された核酸・ペプチドなど複雑なバイオ分子を正確に表現
- 長期間の相互運用性、組織外とのデータの互換性を維持
- 最先端の配列-活性相関解析・機械学習で創薬サイクルを改善



PROTACの構造活性相関解析を革新

Targeted Protein Degradation (TPD)
解析モジュールオプション

- リンカーによって結合された2つのリガンドを容易に解析
- SDFやSMILES形式の分子は簡単にインポート可能
- リガンドの配置により分子の向きが自動的に調整される為見やすい
- 各行で任意のデータでソート・値の着色可能
- R-Group TableとSubstituent Analysis Tableの追加が可能

