

A complex network diagram on the left side of the slide. It consists of numerous nodes of varying sizes and colors (black, grey, yellow, red) connected by thin black lines. A prominent feature is a dense cluster of blue lines that converge towards the center of the network, creating a funnel-like shape. The overall structure suggests a highly interconnected system or data flow.

D360 - マルチモダリティ対応機能の強化と、 AI機能による社内文書との連携

2023年8月24日

サターラ合同会社
山本 博資
中島 保登

本日のアジェンダ

Time	Agenda	Speaker
10:00	冒頭ご挨拶/サターラ会社概要/D360概要紹介/Certara AI紹介	山本 博資
10:15	D360 新機能ご紹介（マルチモダリティ対応機能の強化） 社内文書との連携（Certara AI との連携）	中島 保登
10:45	質疑応答	山本 博資 中島 保登
10:55	閉会	山本 博資



サターラ会社概要紹介

患者さんにいち早く新薬を届ける

What is Certara?

サターラは医薬品開発企業のパートナーとして、製薬会社様の効果的で重大な意思決定を多角的に検討し、最善のアウトカムを得るためのサポートを提供いたします。

あらゆる医薬品開発フェーズに応じて、信頼性の高い意思決定をサポートし、開発期間の短縮、コスト削減および患者様のためのアウトカム向上を実現します。

2014年以降の米国 FDA への90%以上の新薬承認申請において、
当社のバイオシミュレーションソフトウェアまたは当社のコンサルティングサービスが使われました。

統合的な
医薬品開発アプローチ

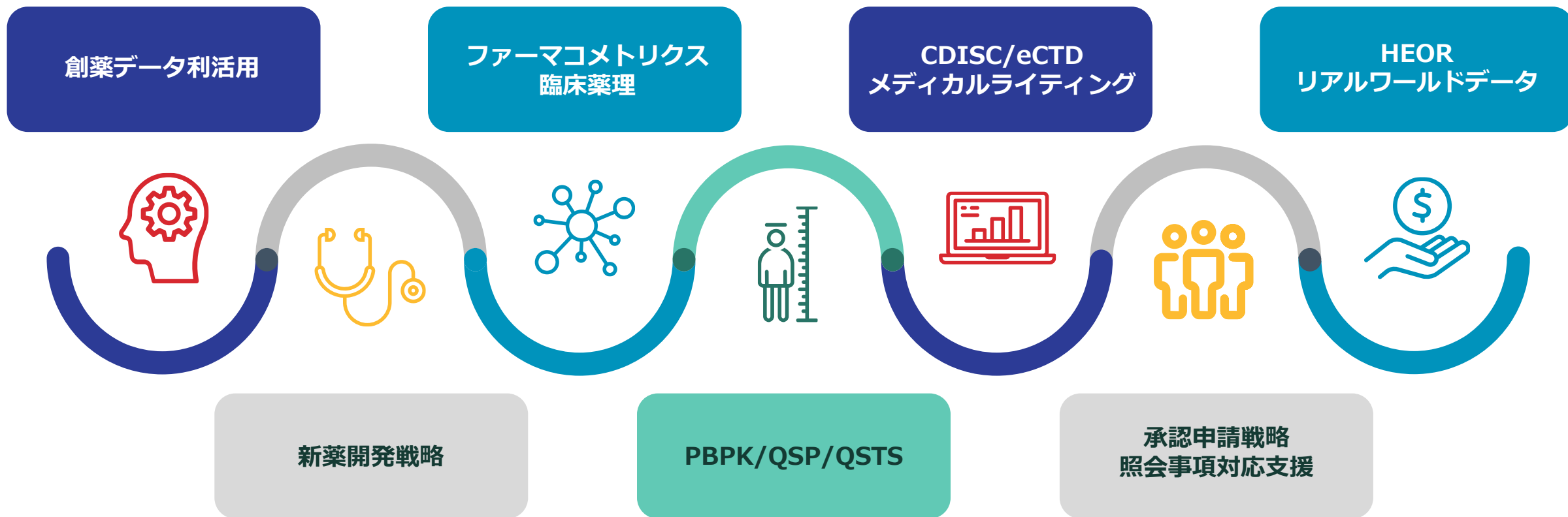
レギュラトリー
サイエンス

バイオシミュレーション
・インフォマティクス
ソフトウェア

エビデンス&バリュー
&アクセス



サターラがカバーする事業領域



サターラは、専門家チームと業界標準のソフトウェアを活用して医薬品開発を支援しています。

2,000社

世界の顧客数
上位40社中38社が利用

1,100名

サターラの社員数
博士号保持者 350名

250件

**過去4年間に支援した
承認申請数**

90%

2014年以降、米国FDAによる承認を受けた新薬申請*の9割に、サターラのソリューションが活用されています。

サターラが提供するソフトウェア

サターラはサイエンティフィックでレギュレーションに対応したソリューションを提供いたします





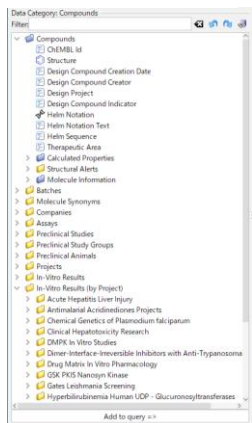
D360とは

統合検索参照の特長



新しいAssayプロトコルのデータも
含めて検索してみよう

データカタログ



データを選択



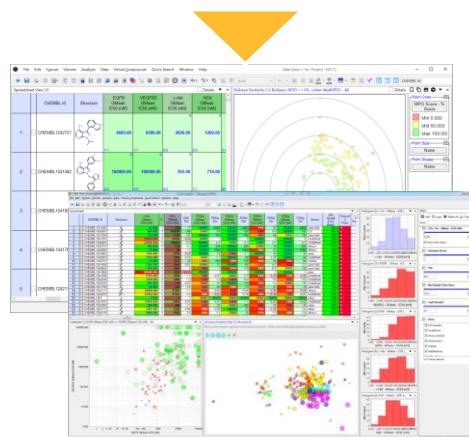
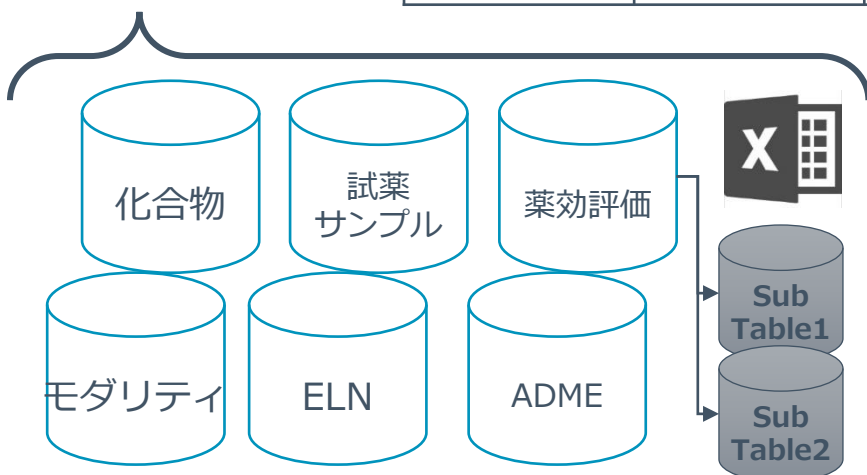
Structure	Assay 1 IC50...	Assay 2 EC50...	Assay Curve
	0.5...	25.5	3/4
	1.2...	30.8	2/3
...

セルフサービスでのデータアクセス

- ✓ 必要なデータをユーザが選択して収集
- ✓ 複数のAssayデータの集計と参照
- ✓ 化学構造、配列、アッセイチャートを1つに集約
- ✓ ローカル保存のデータを追加して解析可能
→ 共同研究などシステムに登録できないデータ
なども解析が可能に

💡セルフサービス

- 研究者がSQLやツール使用法の習得は不要
- ユーザ自身が必要なタイミングで必要情報を収集



D360 はCertara AIと連携が可能に

接続データソースの例

電子実験ノート



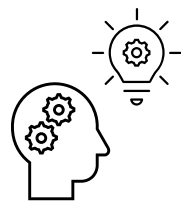
画像データ



文書形式の情報



様々なデータソースをCertara AIにインプット



Certara AIとの連携と情報の有効活用

ドキュメントタイプの情報の活用が可能に！

自然言語処理技術により、情報を適切に解釈し、
既存情報と紐づけて適確に表示

- ✓ 論文情報から必要な情報を適切に収集
- ✓ 社内ドキュメントの埋もれがちな情報を有効活用
- ✓ より効率的なスクリーニングに活用可能
- ✓ 研究情報の統合プラットフォームとしての活用

D360の画面イメージ

Structure	D360データ			Document A群	Document B群	病理画像 A群
	Assay 1 IC50...	Assay 2 EC50...	Assay Curve	タンパク質 候補	対象疾患 候補	対象画像
	0.5...	25.5	3/4	GPCR 1	Oncology1 Oncology2	
	1.2...	30.8	2/3	Kinase1	Inflammation1	
...	GPCR 2	CNS1 CNS2	



Certara AI (Vyasa)とは

Vyasa Layer

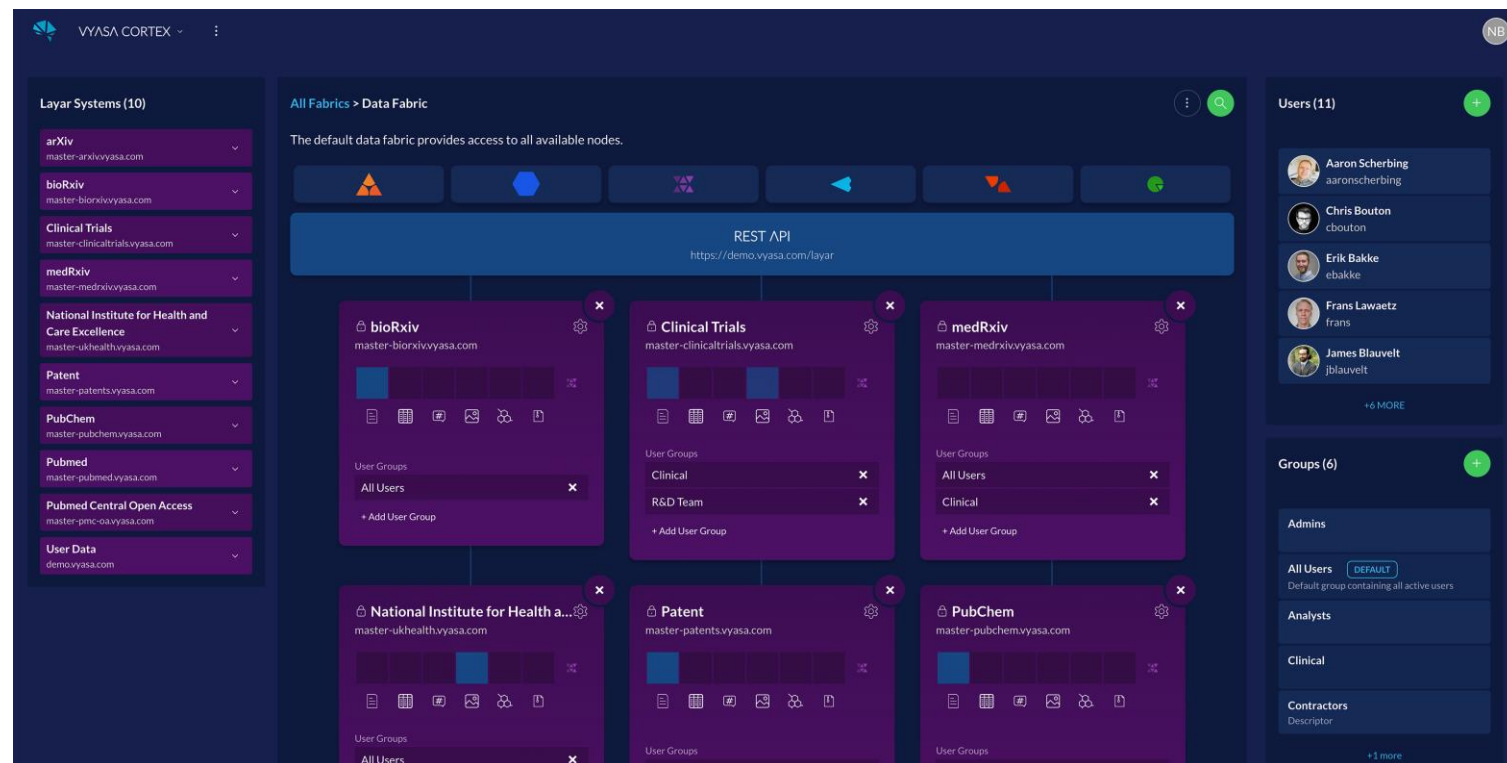
Layarデータ・ファブリックのメリット

- シングルプラットフォームでの社内&社外データソースの統合
- 非構造化文書を簡単に検索しアクセス（PDF、注釈、イメージなど）
- 自然言語検索によるデータからの新たな知見の発見
- 構造・非構造データセットの高度なナレッジグラフや表形式での検索
- データソースを組織全体でセキュアかつフレキシブルな環境で利用可能



Reference Data Fabric

CertaraのReference Data Fabricは4700万件を超える医学生物学的文献をディープラーニングで解析したインデックスで、毎日継続的に更新し、科学的文献や発表済臨床試験などに対するアクセスを拡充します。また、既存のメタアナリシスデータセットの重要なエンティティの検索・抽出を拡張できる高度な分析ツールにより利用者の研究を加速します。



リファレンスデータファブリックの参照元文献（4700万件超）



ディープラーニングによるテキスト分析

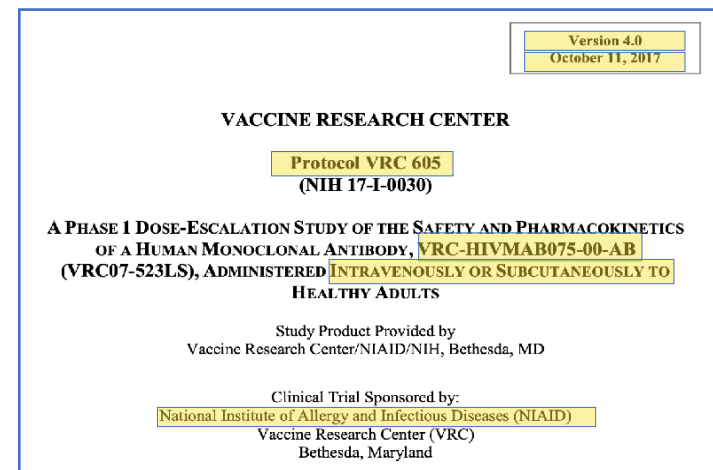
テキスト分析モデル

- Vyasaは大規模言語モデル (LLMs) を活用し高度なコンテンツ解析を可能に
- 大規模言語モデルで、文章の構造、時制、その他の文脈を考慮し、文中の用語の関連を認識
- 固有表現抽出 (NER) は、構造化・非構造化データから重要なエンティティを特定し知見を得ることが可能に
- 質問応答 (QA) モデルは利用者による自然言語での質問を解釈し既存の文書やデータ・ファブリックの中から答えを見つけることを可能に（抽出型 QAで、生成型QAではございません）
- 個別にラベル付けしたスプレッドシートを通して標準化を推進するためのモデルも用意しています（分類 & 関係抽出）

ABSTRACT

Introduction: Two studies were carried out to investigate the efficacy and safety of **luseogliflozin** added to existing oral antidiabetic drugs (OADs) in Japanese **type 2 diabetic** patients inadequately controlled with OAD monotherapy. Materials and Methods: In the trial involving add-on to **sulfonylureas** (study 03-1), patients were randomly assigned to receive **luseogliflozin** 2.5 mg or a placebo for a 24-week double-blind period, followed by a 28-week open-label period. In the open-label trial involving add-on to other OADs; that is, **biguanides**, **dipeptidyl peptidase-4 inhibitors**, **thiazolidinediones**, **glinides** and **α-glucosidase inhibitors** (study 03-2), patients received **luseogliflozin** for 52 weeks. Results: In study 03-1, **luseogliflozin** significantly decreased glycated **hemoglobin** at the end of the 24-week double-blind period compared with the placebo (-0.88%, P<0.001), and glycated **hemoglobin** reduction from baseline at week 52 was -0.63%. In study 03-2, **luseogliflozin** added to other **OADs** significantly decreased glycated **hemoglobin** from baseline at week 52 (-0.52 to -0.68%, P<0.001 for all OADs). Bodyweight reduction was observed in all add-on therapies, even with **agents** associated with **weight gain**, such as **sulfonylureas** and **thiazolidinediones**. Most adverse events were mild in severity. When added to a **sulfonylurea**, incidences of hypoglycemia during the double-blind period were 8.7% and 4.2% for **luseogliflozin** and placebo, respectively, but no major hypoglycemic episodes occurred. The frequency and incidences of adverse events of special interest for **sodium glucose cotransporter 2 inhibitors** and adverse events associated with combined OADs were acceptable. Conclusions: Add-on therapies of **luseogliflozin** to existing OADs improved glycemic control, reduced bodyweight and were well tolerated in Japanese **type 2 diabetic** patients. These trials were registered with the **Japan Pharmaceutical Information Center** (add on to sulfonylurea: JapicCTI-111507; add on to other OADs: JapicCTI-111508). †

固有表現抽出



抽出型質問応答

大量のPDFからデータポイントを収集する抽出型QA

TJ301 Protocol No.: CTJ301UC201 Date: 16 May 2017
Solution for Injection Ver.1.1
Clinical Trial Protocol Supersedes: Ver.1.0
Page 1 of 97

CLINICAL TRIAL PROTOCOL

A Phase II, Randomized, Double-blind, Placebo-controlled Study to Evaluate the Safety and Efficacy of TJ301 (FE 999301) Administered Intravenously in Patients with Active Ulcerative Colitis

Protocol Number: CTJ301UC201

Investigational Medicinal Product: TJ301 (solution for injection), also referred to as FE 999301 and Olamkicept

Indication: Active Ulcerative Colitis

Phase: 2

Investigators: Multicenter, international, across Mainland China, Taiwan, Republic of Korea and Australia

Coordinating Investigator Prof. Dr. Minhu Chen
Chair, Department of Gastroenterology and Hepatology
Vice President
The First Affiliated Hospital, Sun Yat-sen University
58 Zhongshan Road, Guangzhou, China

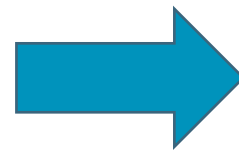
Expert committee Prof. Dr. Stefan Schreiber
Institute for Clinical Molecular Biology University Hospital
Schleswig-Holstein
Schittenhelmstrasse 12, 24105 Kiel, Germany

Name and Address of Sponsor: Leading Biopharm Limited
Sponsor Contact:
Yin Liu
Suite 802, OmniVision Park West Tower
88 Shangke Road, Pudong, Shanghai 201210, China
Tel: + 86 135 0178 1723

GCP Statement: This trial will be performed in compliance with GCP.

The information in this document is confidential and is proprietary to Leading Biopharm Limited. It is understood that information in this document shall not be disclosed to any third party, in any form, without prior written consent of an authorized officer of Leading Biopharm Limited.

Leading Biopharm Limited **CONFIDENTIAL**



TJ301 Protocol No.: CTJ301UC201 Date: 16 May 2017
Solution for Injection Ver.1.1
Clinical Trial Protocol Supersedes: Ver.1.0
Page 1 of 97

治験の適応症は?

CLINICAL TRIAL PROTOCOL

A Phase II, Randomized, Double-blind, Placebo-controlled Study to Evaluate the Safety and Efficacy of TJ301 (FE 999301) Administered Intravenously in Patients with Active Ulcerative Colitis

Protocol Number: CTJ301UC201

Investigational Medicinal Product: TJ301 (solution for injection), also referred to as FE 999301 and Olamkicept

Indication: Active Ulcerative Colitis

Phase: 2

Investigators: Multicenter, international, across Mainland China, Taiwan, Republic of Korea and Australia

Expert committee Prof. Dr. Stefan Schreiber
Institute for Clinical Molecular Biology University Hospital
Schleswig-Holstein
Schittenhelmstrasse 12, 24105 Kiel, Germany

Name and Address of Sponsor: Leading Biopharm Limited
Sponsor Contact:
Yin Liu
Suite 802, OmniVision Park West Tower
88 Shangke Road, Pudong, Shanghai 201210, China
Tel: + 86 135 0178 1723

GCP Statement: This trial will be performed in compliance with GCP.

The information in this document is confidential and is proprietary to Leading Biopharm Limited. It is understood that information in this document shall not be disclosed to any third party, in any form, without prior written consent of an authorized officer of Leading Biopharm Limited.

Leading Biopharm Limited **CONFIDENTIAL**

患者さんの年齢層は?

治験の主要評価項目は?

60~300ページ以上の長さになることも!

リアルタイムのナレッジグラフ

Axon は大量のテキストに幅広い質問を投げるための自然言語の質問回答(QA)ツールです。ユーザはエビデンスノードを介して抽出された回答を調査できます。ナレッジグラフはLayarデータファブリックに接続したコンテンツからモデル予測回答に基づいてリアルタイムで構築されます。

The screenshot displays the VYASA AXON interface. At the top, there is a search bar with the text "Ask a question..." and a "Search" button. Below the search bar, the interface is divided into several sections:

- Questions:** A sidebar on the left lists several questions, including "what adverse effects are associated with quanapril?".
- Knowledge Graph:** The central area features a complex network of nodes and edges. Nodes contain text such as "hypertension (2%), dizziness (6%) and increased cough (12%)", "headache, dizziness, and upper respiratory infection", and "what adverse effects are associated with enalapril?". Edges represent relationships between these concepts.
- Search Results:** On the right, a panel shows "Search results for: cough" with "1 Answer Total" and a "View in CODEX" button. Below this, a "Graph Properties" section indicates "No graph data found."
- Text Summary:** A large text block on the right provides a detailed summary of the search results for "cough". It mentions a study by the Hunter Hypertension Research Group involving 25 patients with mild to moderate hypertension. The summary states that "cough" was the principal adverse effect, occurring in 12.8% of patients. Other adverse effects mentioned include dizziness, headache, and increased cough.

本日のご紹介内容について

本日のご紹介内容は以下となります。

D360 新機能のご紹介

D360 と Certara AI との連携による化合物と社内文書の連携例

もし上記以外にの内容にご興味がありましたら、是非アンケートにてご希望をご記載ください。

【ご紹介内容】

- 基本的な機能のご紹介
- 低分子の解析、バーチャルライブラリの生成
- モダリティ対応、ペプチドの解析
- Certara AI ソリューションの紹介



D360 の新機能

D360 の新機能、改善要望への対応

D360 のバージョンアップは以下で対応します

【新機能・改善要望への対応】

- カスタマーステアリングコミッティー（D360導入企業の代表）からのフィードバック（戦略的方向性）
- 発展する研究ニーズと製品の将来的な安定と成長に対する Certara の視点
- 個別のお客様のリクエスト対応

【Certara製品やパートナー製品との連携強化】

- Certara の関連製品との連携
 - ✓ Certara AI (Vyasa) データファブリックソリューション Layar による社外文献、社内文書との連携と活用
- パートナー製品との連携
 - ✓ ChemAxon Design Hub との連携による DMTAサイクルの強化

D360 のバージョンアップ

D360 のバージョンアップ作業は以下で対応します

【製品サポートポリシー】

- D360 YY.0 は1月31日、YY.5 は7月31日にリリースします。
- D360 はリリース後2年間サポートします。

【バージョンアップポリシー】

- サポートバージョンからのバージョンアップにあたっては追加の費用負担は不要です。

【バージョンアップ作業】

- D360 現行バージョンのデータベースに変更（テーブル、カラムの追加等）の適用を行います。
- D360 の新バージョンをインストールします。
- D360 の新バージョンに旧バージョンの設定を適用します。
- 上記作業をTEST環境で実施し、検証後にPROD環境に同じ作業を実施します。

バージョンアップ作業に必要な時間は数時間

D360 の新機能

D360 23.5 の新機能について、

【配列ベースのモダリティ対応】

- BILN (Boehringer-Ingelheim Line Notation) 配列表記の採用
- HELM表記の改良
- Sequence Alignment Viewer の改良
- HELMサポートの更新

【ユーザーインターフェース更新】

- D360アプリケーションのデザインを全面的に刷新 (U I の整理を含みます)

【データ可視化】

- Spider Plot/Rader Plot フィールド

【ワークフロー改善】

- コア管理、フォーム、パフォーマンス、Save/Openダイアログなど

【管理機能・API改善】

- インストール済 Spotfire ルックアップ、TLS ポート 443 サポート、サービストークンによるアクセス制御など

D360 の新機能 - デザインの刷新 - メイン画面

The screenshot shows the D360 main interface. On the left is a dark sidebar with a yellow border containing the D360 logo and navigation menus: 'PERFORM A SEARCH', 'WORKSPACES', 'DATASETS & LISTS', and 'ALERTS & SCHEDULES'. The main area is divided into several panels: 'Notifications', 'QuickViewer', 'Peptide Sample List', 'Peptide with Activities', 'Training c-Src Project -GD', and 'Personal c-Src Project -GD'. Three blue arrows point from text boxes below to specific elements: 'Everyone ワークスペース' points to the 'Peptide with Activities' header, 'Training ワークスペース' points to the 'Training' header, and 'Personal ワークスペース' points to the 'Personal' header. The 'Training' and 'Personal' headers are highlighted in light blue, while the 'Everyone' header is pink. The sidebar and notification panels are highlighted in light yellow.

D360 メイン画面

- **D360 ロゴ**
 - ✓ D360 製品のロゴを刷新しました
- **メニュー**
 - ✓ Quick Link のメニュー項目を整理しました
 - ✓ アイコンを更新しました
- **クエリタイトルバーの色**
 - ✓ ワークスペースによりクエリタイトルバーを色分けしました

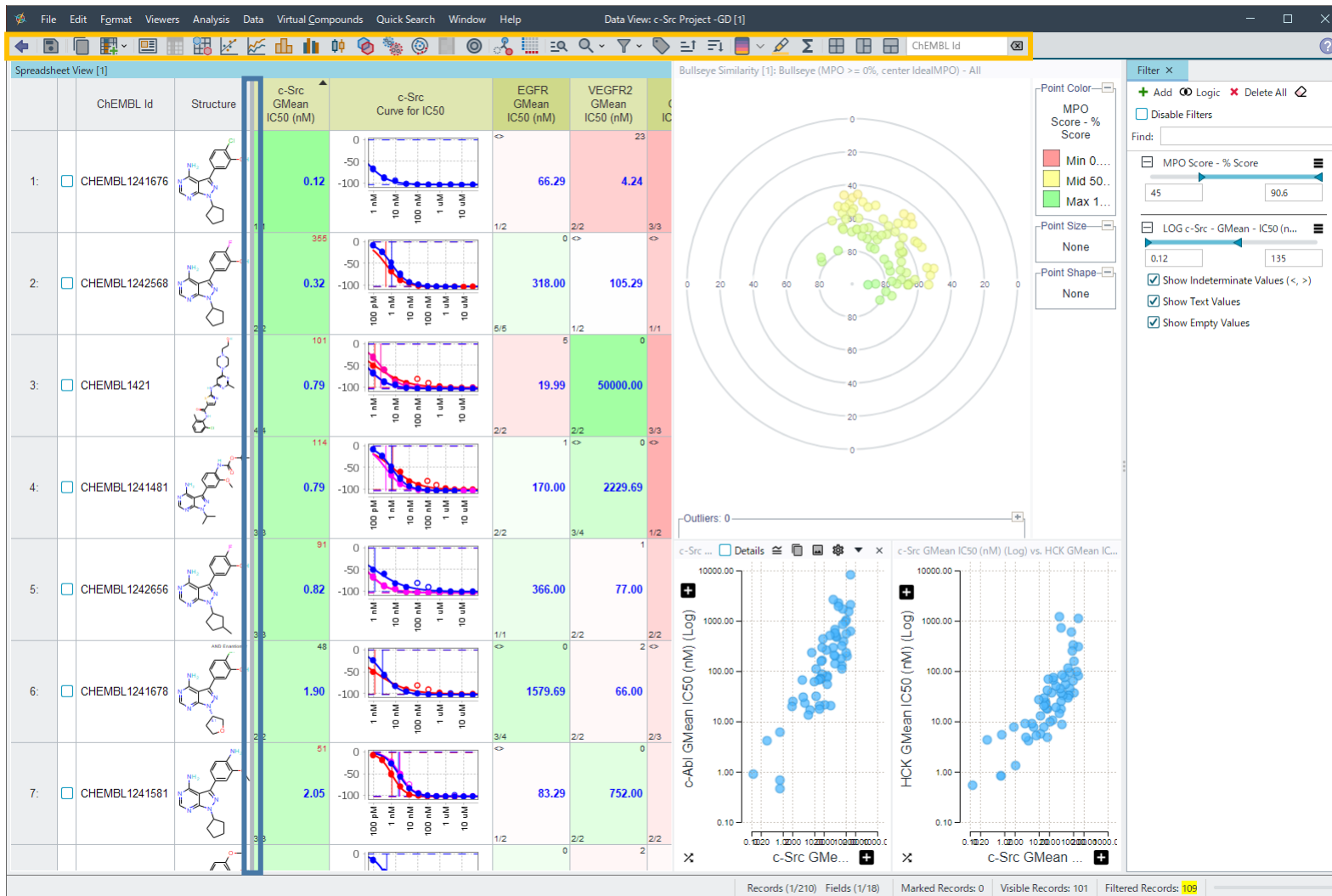
D360 の新機能 - デザインの刷新 - クエリ設定画面

数値、文字など
データ型で色分け

D360 クエリ画面

- **メニュー**
 - ✓ メニュー構成を整理しました
 - ✓ アイコンを整理しました
- **データカタログ**
 - ✓ アイコンを更新しました
 - ✓ データ型により色分けしました
- **ヘルプ**
 - ✓ 各機能のヘルプへのリンクを設けました

D360 の新機能 - デザインの刷新 - 解析画面



D360 解析画面 (スプレッドシート)

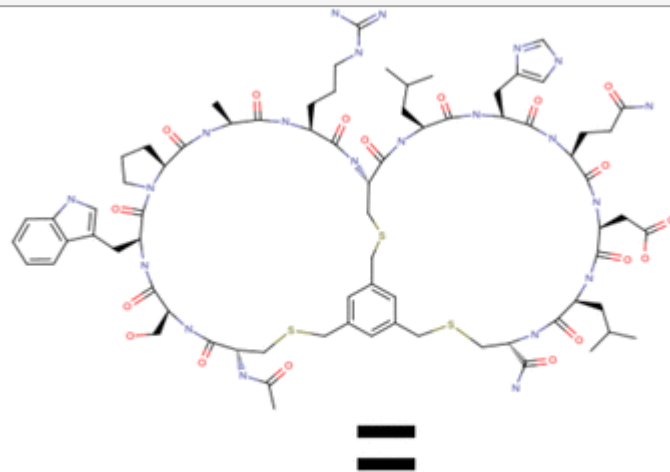
- **メニュー**
 - ✓ アイコンを更新し、ツールバー構成を整理しました
- **スプレッドシート**
 - ✓ 固定カラムとの境界を明確にしました

BILN 表記の採用

The screenshot shows the ACS Publications website interface. The article title is "BILN: A Human-Readable Line Notation for Complex Peptides" by Thomas Fox*, Michael Bieler, Peter Haebel, Rodrigo Ochoa, Stefan Peters, and Alexander Weber. The article is published in the Journal of Chemical Information and Modeling (JCI-M). The page displays the article's citation information, including the DOI (10.1021/acs.jcim.2c00703), the number of article views (690), and the number of citations (7). There are buttons for "Read Online" and "PDF (2 MB)". The article is categorized under "APPLICATION NOTE".

Abstract

We present an easy, human-readable line notation for complex peptides.



Ac-C(1,3)-S-W-P-A-R-C(2,3)-L-H-Q-D-L-C(3,3)-NH2.135TMB(1,1)(2,2)(3,3)

BILN 表記採用の経緯 (BILN: Boehringer Ingelheim Line Notation)

• 従来の配列表記

- ✓ FASTA: 読みやすいが、非天然モノマーや分岐ペプチド、環状ペプチドなどの表現ができない
- ✓ HELM: 非天然モノマーや分岐ペプチド、環状ペプチドなどが正確に表現できるが、読みづらい

• D360 の配列表記

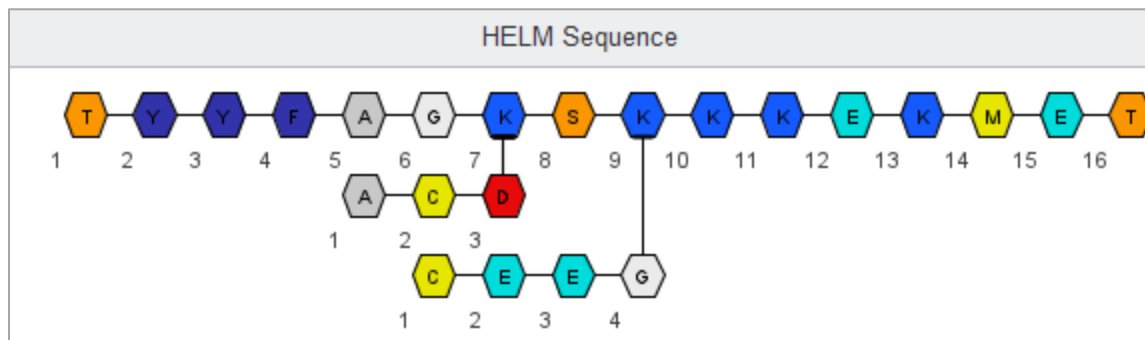
- ✓ D360は独自の配列表記法を採用し、v22.5から分岐ペプチド、環状ペプチドの表記に対応してきました
- ✓ D360 v23.5 では公開された標準表記であるBILNでの配列表記し、読みやすさを向上するとともに、配列アラインメントへの組み込み機能を提供します

Reference:

[Thomas Fox, Michael Bieler, Peter Haebel, Rodrigo Ochoa, Stefan Peters, and Alexander Weber, Journal of Chemical Information and Modeling 2022 62 \(17\), 3942-3947](#)

配列表記 - スプレッドシート

ID	HELM Sequence	HELM Notation	Sequence (BILN) Notation
1: DBPEP_001		PEPTIDE1{T.Y.Y.F.A.G.K.S.K.K.K.E.K.M.E.T}PEPTIDE2{A.C.D}PEPTIDE3{C.E.E.G}\$PEPTIDE1,PEPTIDE2,7:R3-3:R2 PEPTIDE1,PEPTIDE3,9:R3-4:R2\$\$\$V2.0	T-Y-Y-F-A-G-K(1,3)-S-K(2,3)-K-K-E-K-M-E-T.A-C-D(1,2).C-E-E-G(2,2)



【HELM】

```
PEPTIDE1{T.Y.Y.F.A.G.K.S.K.K.K.E.K.M.E.T}
PEPTIDE2{A.C.D}
PEPTIDE3{C.E.E.G}$
PEPTIDE1,PEPTIDE2,7:R3-3:R2|
PEPTIDE1,PEPTIDE3,9:R3-4:R2
$$$V2.0
```

【D360 Sequence (BILN)】

```
T-Y-Y-F-A-G-K(1,3)-S-K(2,3)-K-K-E-K-M-E-T.
A-C-D(1,2).
C-E-E-G(2,2)
```

D360 での配列の取り扱い

• D360 で取り扱う配列

- ✓ HELM
HELMのテキスト表記から描画できます
- ✓ D360 Sequence (BILN)
配列の Alignment や Similarity の評価に
利用します (HELMから変換できます)

D360 Sequence を BILN で表記することで
読みやすくなります

お手持ちのデータがシンプルな核酸/アミノ酸配列
でも D360 Sequence に変換し解析に利用
頂けます

配列表記 - アライメント結果

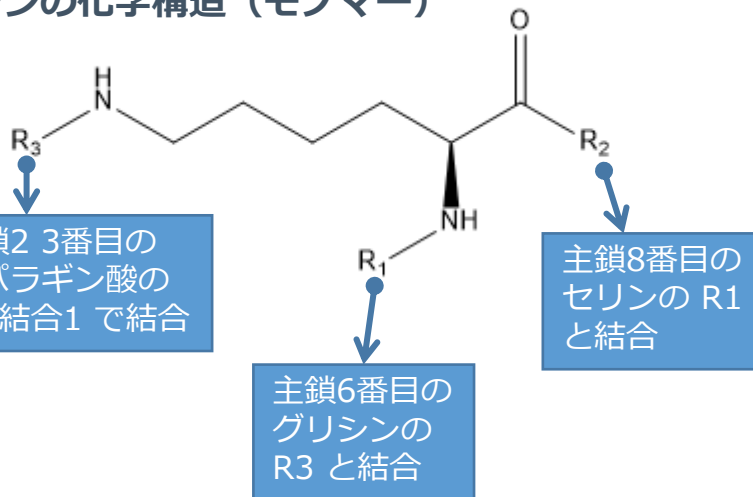
Alignment Viewer

6	7	8
G	K	S
G	K	S

D360 Alignment Viewerの
主鎖の7番目の位置のリジン

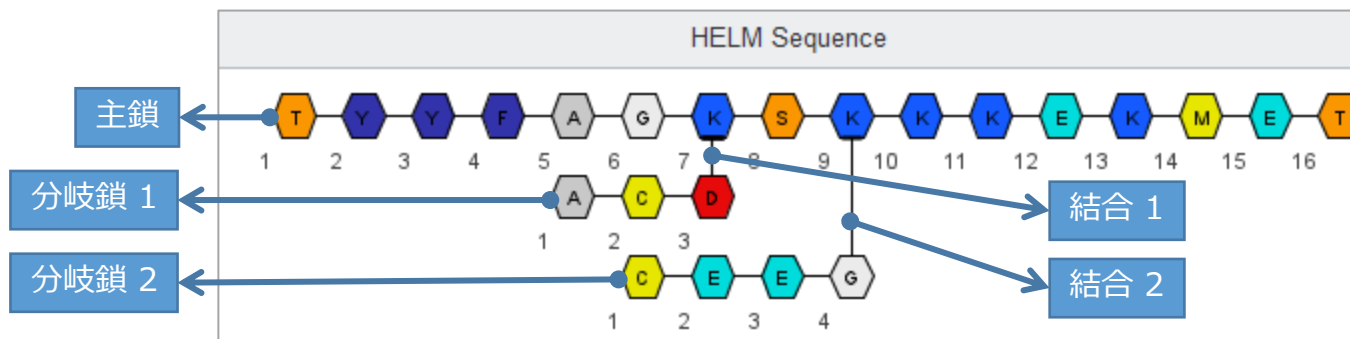
B1-1 R3 はリジンの R3 が
分岐鎖1(B1) と結合1で結合
していることを示します

リジンの化学構造 (モノマー)



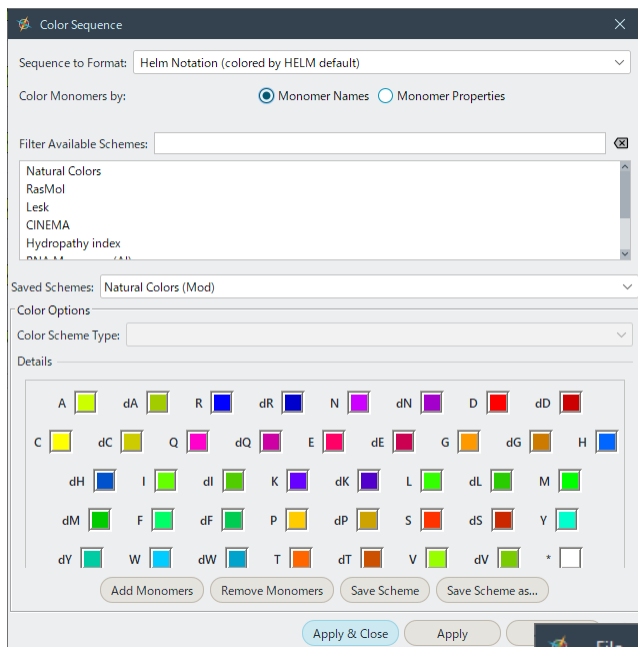
アライメント結果の表記

- 分岐鎖を含むペプチドのアライメント結果は分岐箇所モノマーに情報を表示します
 - ✓ アライメント結果は、主鎖、分岐鎖を切り替えて表示します
 - ✓ 分岐箇所モノマーには、どの鎖と、どの結合で、どの結合位置で結合するか表示されます



HELM描画の改良

配列の配色設定画面



HELM 配列の PSA での配色例

	ChEMBL Id	Helm Notation (colored by PSA)	MHC class I BA (FLPSDYFPSV) GMean IC50 (nM)
1: <input type="checkbox"/>	CHEMBL402482	I L W Q V P F S V	1.698
2: <input type="checkbox"/>	CHEMBL412034	I L F Q V P F S V	2.000
3: <input type="checkbox"/>	CHEMBL410648	F L D Q V P F S V	2.198

HELM表記の色付け

モノマーの配色

- ✓ ナチュラルカラーの配色で、D体とL体について異なる色を設定できます（デフォルトでは同色）

プロパティによる配色

HELM表記の配色にモノマープロパティが利用可能になりました

- ✓ Side Chain H-bond Donor/Acceptor
- ✓ Side Chain Min/Max bond path to H-bond Donor
- ✓ Side Chain Min/Max bond path to H-bond Acceptor
- ✓ Side Chain Rotatable Bonds
- ✓ Monomer Polar Surface Area
- ✓ Monomer AlogP
- ✓ Side Chain Weight
- ✓ Side Chain Volume

Alignment 結果表示の改良

Alignment 結果表示例 (リファレンス配列での配色例)

Reference CHEMBL402482 Alignment: Similarity Matrix - All

Sequence Alignment: Main

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
CHEMBL402482	I	L	W	Q	V	P	F	S	V
CHEMBL412034	I	L	F	Q	V	P	F	S	V
CHEMBL410648	F	L	D	Q	V	P	F	S	V
CHEMBL415611	Y	L	D	Q	V	P	F	S	V
CHEMBL386178	Y	L	F	P	G	P	V	T	A
CHEMBL386299	Y	L	W	P	G	P	V	T	A
CHEMBL426344	I	L	D	Q	V	P	F	S	V
CHEMBL122183	Y	L	M	P	G	P	V	T	A
CHEMBL110989	G	I	L	T	V	I	L	G	V
CHEMBL440266	I	L	Y	Q	V	P	F	S	V
CHEMBL428098	Y	L	F	P	G	P	V	T	V
CHEMBL407614	F	L	L	T	R	I	L	T	I
CHEMBL437514	I	L	M	Q	V	P	F	S	V

87 of 87 Sequence... Unregister All Copy Align... Extract to S...

リファレンス配列1

リファレンス配列2

リファレンス配列3

配列1に一致

配列1に一致せず、配列2に一致

配列1、に一致せず、配列3に一致

Alignment 結果の改良

- 複数のリファレンス配列との一致
 - ✓ 従来は1つのリファレンスと同一のモノマーのハイライトに対応していました
 - ✓ 複数のリファレンスを指定したモノマーのハイライトに対応しました
- 配列の配色ルール
 - ✓ 配列1に一致するモノマーは、配列1の配色
 - ✓ 配列1に一致せず、配列2に一致するモノマーは、配列2の配色
 - ✓ 配列1、2に一致せず、配列3に一致するモノマーは、配列3の配色

データ可視化 - Spider Plot/Radar Plot

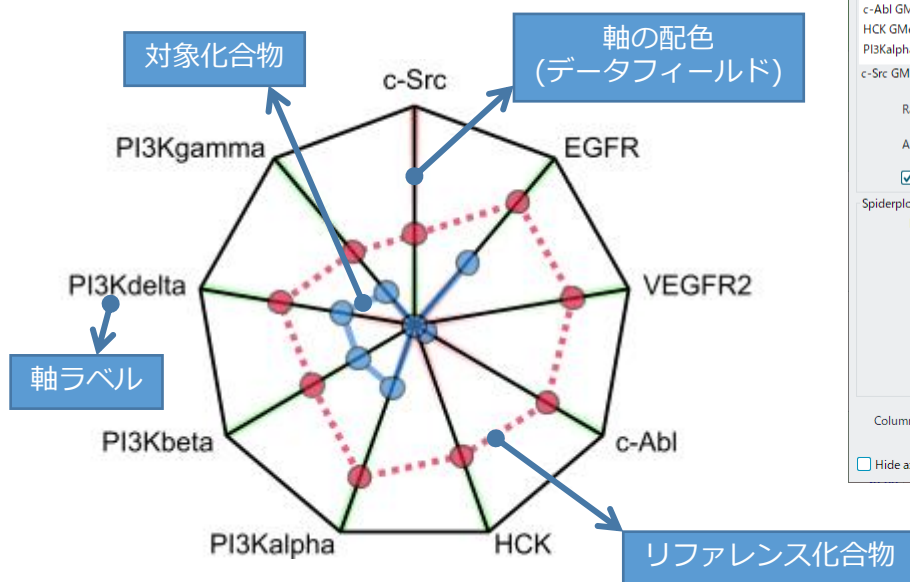
Spider Plot 表示例 (スプレッドシート)

	ChEMBL Id	Structure	Spiderplot	c-Src GMean IC50 (nM)	EGFR GMean IC50 (nM)	VEGFR2 GMean IC50 (nM)	c-Abl GMean IC50 (nM)	HCK GMean IC50 (nM)	PI3Kalpha GMean IC50 (nM)	PI3Kbeta GMean IC50 (nM)	PI3Kdelta GMean IC50 (nM)	PI3Kgamma GMean IC50 (nM)
1:	<input type="checkbox"/> CHEMBL1241676			0.12	66.29	4.24	0.95	0.57	225.00	940.29	103.00	146.29
2:	<input type="checkbox"/> CHEMBL1242568			355	0	0	0	0	0	0	0	0

可視化機能の追加

- **Spider Plot/Radar Plot を追加**
 - ✓ ターゲット/オフターゲットのアッセイプロファイルを確認しやすくなります
- **Spider Plot/Radar Plot の設定**
 - ✓ 軸の範囲、Linear/Log スケール設定
 - ✓ 軸ラベル
 - ✓ リファレンス化合物のプロファイル表示
 - ✓ 軸の配色 (データ列の配色を適用)

Spider Plot/Radar Plot 例



The 'Create Spiderplot' dialog box includes the following configuration options:

- Use MPO Scoring Data Fields:** MPO Score
- Select Data Fields:** Filter, Show Hidden Columns
- Mol Weight, LogP (ACD), EGFR/c-Src, MPO Score - % Score**
- Spiderplot Axes:**
 - Data Field: c-Src GMean IC50 (nM)
 - Position (degrees): 0
- c-Src GMean IC50 (nM) Details:**
 - Range: From: 0, To: 100000, Scaling: Linear (selected), Log
 - Axis Label: c-Src, Show Max Value Label
 - Color axis by Color Scheme (checked)
- Spiderplot Lines:**
 - Profile Line: Color: Blue, Style: Solid, Thickness: 10
 - Reference Line: ID: CHEMBL1242757, Color: Red, Style: Dashed, Thickness: 10
 - Color Axes by MPO Function Settings: Color Scheme: Green/Yellow/Red, Thickness: 2
- Column Name:** Spiderplot
- Buttons:** Add Spiderplot Data Field, Cancel



D360とCertara AIとの連携

D360 と Certara AI の連携

Data Fabric の設定画面

The screenshot displays the Certara AI Data Fabric interface. On the left, there is a sidebar with 'Layer Systems (13)' including ACR Abstracts, arXiv, bioRxiv, Biotech News, Clinical Trials, medRxiv, National Institute for Health and Care Excellence, Patent, PubChem, and Pubmed. The main area shows 'All Fabrics > APAC D360 demo' with a 'REST API' button highlighted by a blue box and an arrow pointing to a 'User Data' modal window. The modal window shows a grid of data and a 'User Groups' section with 'All Users' selected. Below the modal, there is a 'User Data' table with columns for ChEMBL Id, Structure, c-Src GMean IC50 (nM), c-Src Curve for IC50, EGFR GMean IC50 (nM), VEGFR2 GMean IC50 (nM), c-Abl GMean IC50 (nM), HCK GMean IC50 (nM), PI3Kalpha GMean IC50 (nM), PI3Kbeta GMean IC50 (nM), PI3Kdelta GMean IC50 (nM), and PI3Kgamma GMean IC50 (nM). The table contains two rows of data for ChEMBL IDs 1241676 and 1242568.

	ChEMBL Id	Structure	c-Src GMean IC50 (nM)	c-Src Curve for IC50	EGFR GMean IC50 (nM)	VEGFR2 GMean IC50 (nM)	c-Abl GMean IC50 (nM)	HCK GMean IC50 (nM)	PI3Kalpha GMean IC50 (nM)	PI3Kbeta GMean IC50 (nM)	PI3Kdelta GMean IC50 (nM)	PI3Kgamma GMean IC50 (nM)	Mc Weig
1:	ChEMBL1241676	<chem>C1=NC2=C(N1)C(=O)N(C2)C3=CC=C(C=C3)O</chem>	0.12		66.29	4.24	0.95	0.57	225.00	940.29	103.00	146.29	3
2:	ChEMBL1242568	<chem>C1=NC2=C(N1)C(=O)N(C2)C3=CC=C(C=C3)O</chem>	0.32		318.00	105.29	>4.30	4.45	525.00	1020.00	142.00	257.00	3

Certara AI との連携方法

- **Data Fabric の設定**
Certara AI は多様なデータソースに接続し、AI による表現抽出を行い、関連付けて利用できます
 - ✓ PDF や Power Point で作成した報告書類
 - ✓ Excel で作成したサマリテーブル
 - ✓ 測定データ など
- **Data Fabric の利用**
REST API を通して D360 から Data Fabric にアクセスし、関連情報を収集します
 - ✓ Data Fabric から化合物IDなどの紐づけ情報を元に関連する情報を D360 に抽出しリンクを生成します
 - ✓ リンクから必要情報にアクセスします

実際の画面でご紹介します

D360 から Data Fabric へのアクセス

D360 検索結果 (スプレッドシート)

The screenshot shows the D360 interface with a search results spreadsheet and a dialog box for adding document columns. The spreadsheet displays columns for ChEMBL Id, Structure, MPO Score - % Score, and Most Recent Test. The dialog box, titled "Add Layer Document Columns", allows users to select a data fabric (APAC D360 demo) and a keyword column (ChEMBL Id). A blue callout box with an arrow points to the "Add Document Columns" option in the menu and the "Add Layer Document Columns" dialog, with the text "文書へのリンクが追加" (Document link added).

ChEMBL Id	Structure	MPO Score - % Score	Most Recent Test
1: CHEMBL1241676		45.5	12-Mar-2011
2: CHEMBL1242568		56.7	20-Nov-2013

Data Fabric へのアクセス

- **Document Column の追加**
Document Column の追加操作で関連文書へのリンクを取得できます
 - ✓ 対象のデータファブリックを指定
 - ✓ キーワードのカラムを指定
- **文書へのリンクの取得**
Document Column 追加を行うと文書へのリンクを取得できます
 - ✓ 文書数、文書名
 - ✓ 文書へのリンク
 - ✓ 文書ダウンロードのリンク
 - ✓ 文書ソース

このデモ環境の設定は一例です

D360 から文書へのアクセス

D360 検索結果 (スプレッドシート)

リンクから文書を表示

ChEMBL Id	Structure	MPO Score - % Score	Most Recent Test	APAC D360 demo ChEMBL Id Layer Document Count	APAC D360 demo ChEMBL Id Layer Document Name	APAC D360 demo ChEMBL Id Layer Document URL	APAC D360 demo ChEMBL Id Layer Document Download	APAC D360 demo ChEMBL Id Layer Document Source
1: <input type="checkbox"/> CHEMBL1241676		45.5	12-Mar-2011	4	c-src Project Presentation.pptx Structure Similarity and Multi-Parameter Scoring - Looking for Interesting Outliers - D360 (21.5)	https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com?fabric=17&q=%22CHEMBL1241676%22	https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com/download?access_token=dabe9ba1-1370-4761-9bb4-31bbb60c2bda	upload WEBSITE WEBSITE WEBSITE
2: <input type="checkbox"/> CHEMBL1242568						https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com?fabric=17&q=%22CHEMBL1241676%22	https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com/download?access_token=dabe9ba1-1370-4761-9bb4-31bbb60c2bda	upload
3: <input type="checkbox"/> CHEMBL1421						https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com?fabric=17&q=%22CHEMBL1241676%22	https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com/download?access_token=dabe9ba1-1370-4761-9bb4-31bbb60c2bda	upload
4: <input type="checkbox"/> CHEMBL1241676						https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com?fabric=17&q=%22CHEMBL1241676%22	https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com/download?access_token=dabe9ba1-1370-4761-9bb4-31bbb60c2bda	upload

Browser window: <https://certara.vyasa.com/layanweb/#/sources/AYac6EdqkQSDPNBECsD/certara.vyasa.com?fabric=17&q=%22CHEMBL1241676%22>

CODEX LAYAR

Search Layar...

APAC D360 demo

Documents / Current Document

c-src Project Presentation.pptx

Added By: Fabian Rauscher
Added On: Mar 1, 2023
3 Related Documents
View Parsed Text

CERTARA

c-Src Project Presentation

Feb 28 2023
Fabian Rauscher

D360 から文書へのアクセス

- **文書リンク**
文書リンクをダブルクリックすることで、文書にアクセスできます
✓ 複数の文書があるときは対象文書を選択します
- **文書の表示**
Data Fabric のインターフェイス Layar で文書を表示します

このデモ環境の設定は一例です

本日のご紹介内容について

本日のご紹介内容は以下となります。

D360 新機能のご紹介

D360 と Certara AI との連携による化合物と社内文書の連携例

もし上記以外にの内容にご興味がありましたら、是非アンケートにてご希望をご記載ください。

【ご紹介内容】

- 基本的な機能のご紹介
- 低分子の解析、バーチャルライブラリの生成
- モダリティ対応、ペプチドの解析
- Certara AI ソリューションの紹介





お問い合わせ

担当営業：山本 博資（やまもと ひろもと）

メールアドレス：hiromoto.yamamoto@certara.com

携帯電話：080-4780-7770