

D360™ 专注药物研发的科学信息平台

D360 • D360 Express • D360 Capture • D360 Partner • 临床前安全储存

D360™是行业领先的科学数据信息平台，全球有超过6000名研发科学家用其进行小分子和生物制剂的研发及临床前安全研究。它通过自助式的数据访问和内置分析方案来满足研发人员的工作流需求。由此，您可以专注于研发数据的专业解读上，而不是浪费大量时间组装数据。

解决方案满足各种需求：无论小型初创公司还是大型跨国药企

药物研发需要了解来自化学、生物学、逻辑和计算数据等多种来源的复杂数据。无论您是访问单一数据源，还是需要综合的企业级数据整合方案，D360的工具包和附加产品都能针对您企业的实际需求提供灵活的解决方案。这些优化的方案可以让您实现高保真的数据访问，快速而有效地做出执行决策，并以更快的速度深入洞察。D360具有部署简单、易扩展性和易于管理等特性，其众多可定制的功能使得团队之间及外部合作伙伴的相互协作成为可能。

D360桌面用户端提供了一个直观的使用界面，可进行自助数据访问和分析：您只需点击几次鼠标，就可以创建或执行数据检索、转换并以需要的格式进行分析。整个过程无需任何手动数据处理或专属IT技术支持，也无需考虑数据在何处、以何种方式存储。

D360自助信息平台



不局限于数据检索的功能

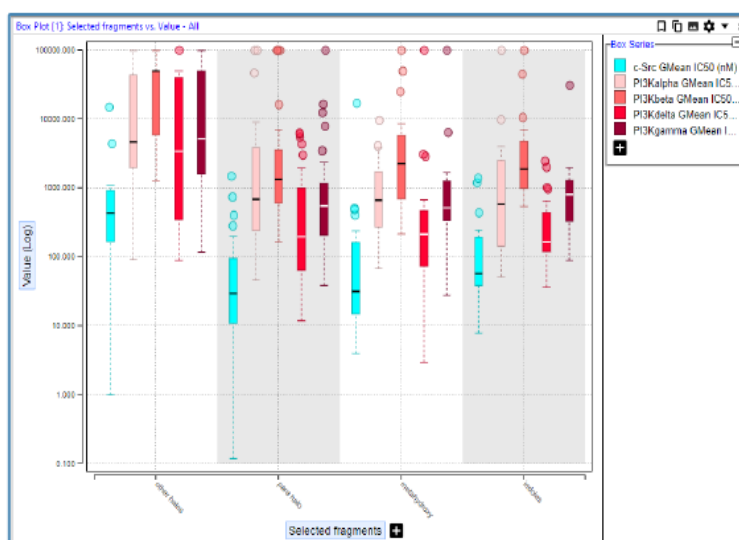
交互式的数据过滤、浏览；大量可视化工具提供内置分析和关键参数的计算。

- 直方图、条形图和箱形图：可以用来对测试组的实验或计算结果进行简单的比较。
- 剂量曲线功能：可以从结果参数拟合出剂量-反应曲线，增强对数据质量的理解，满足生物学家的工作流需求。
- 生物属性总览数据视图：提供了可视化工具来全面查看一种物质在所有测试中的表现。

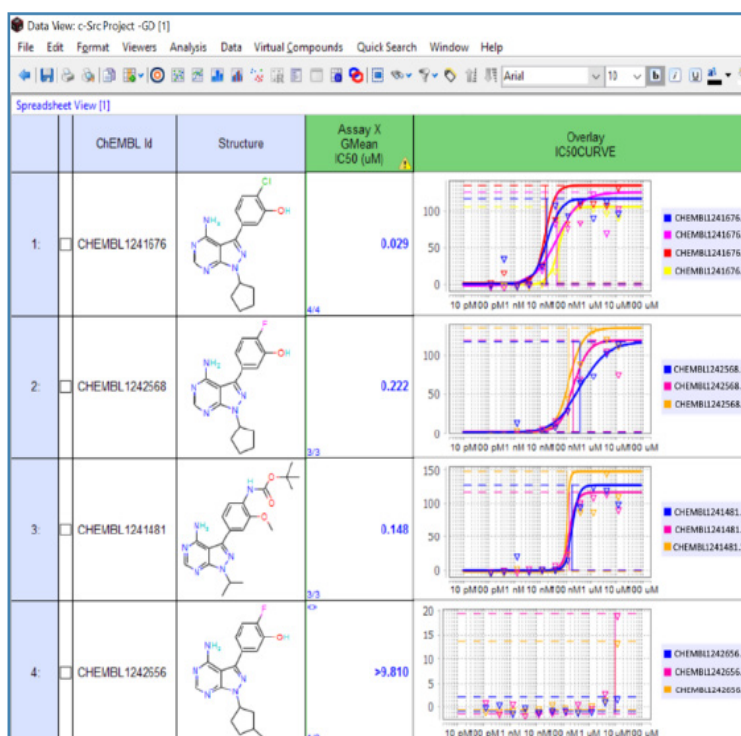
“

D360是我们的信息访问门户，它的灵活性和可扩展性正是我们所寻求的。D360让我们得以发展和壮大，我们的研发团队也在快速转变工作方式，以找到创新的药物发现方法。

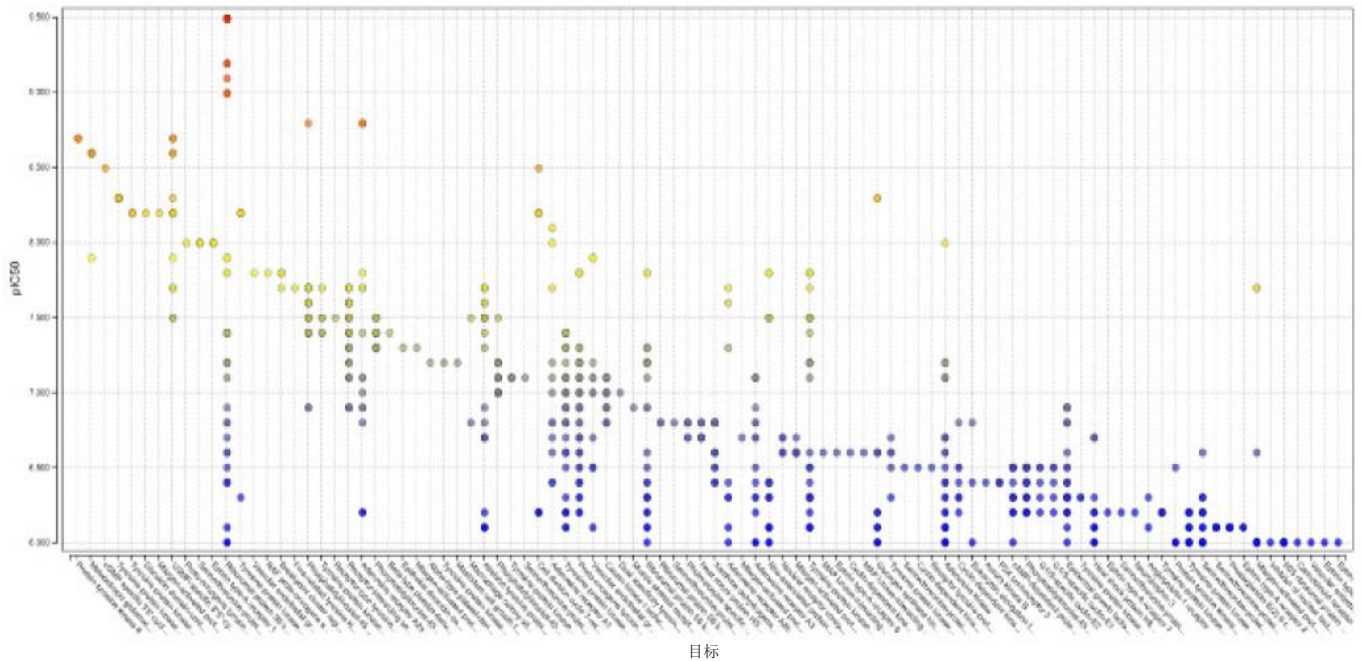
”



箱形图显示了几个系列化合物在主靶标（青色）和其它参考选择性靶标（红色）上的测试活性的分布情况。



多次实验的剂量-反应曲线展示



生物属性总览数据视图只显示每个测试中被识别为主要化合物的测试结果，这些通过默认的聚合函数获得。

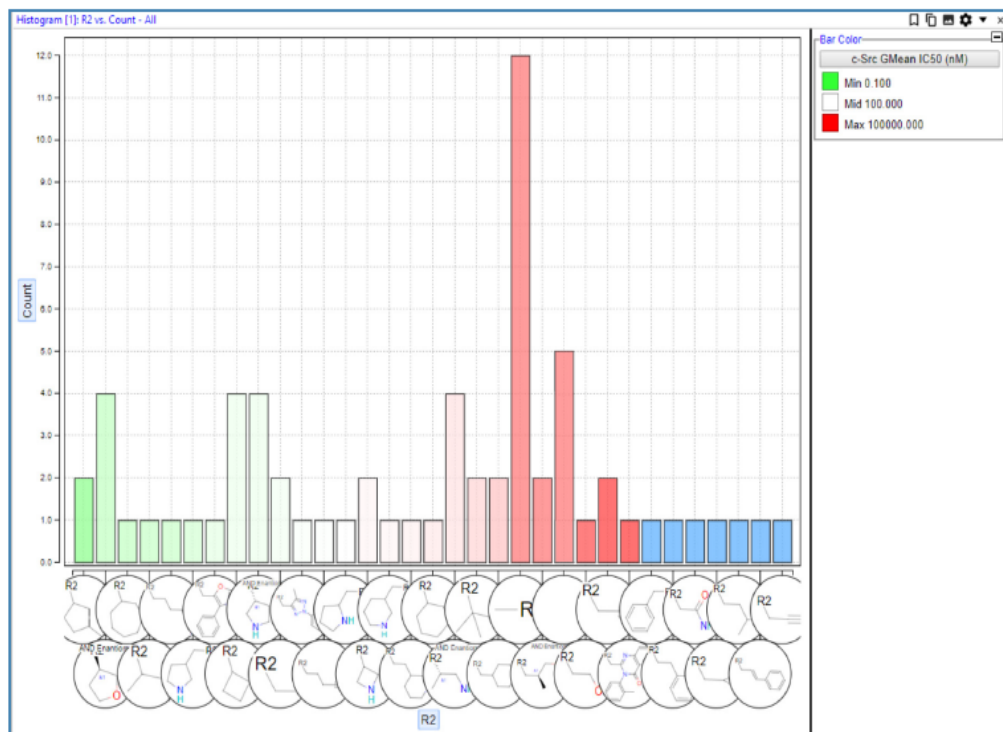
可用于多种形态制剂的数据设计、访问和分析工具

药物研发项目需要考察多种形态的制剂作为疾病治疗手段，如小分子和生物制剂。可能包括寡核苷酸、抗体、多肽、蛋白以及ADC抗体-药物结合物。这些制剂自身和相关的测试过程与数据的呈现方式多种多样。D360提供了这类需求所需的快速数据访问、深入理解分析和协作共享功能，可轻松应用于小分子研发、生物制剂研发以及临床前转化，为每个研究目标量身定制解决方案。

D360小分子研发工具

D360小分子研发工具提供内置的SAR分析和分子设计功能，包括R-基团分析、化学系列和匹配系列分析，可用于小分子的综合设计和分析。

- 匹配分子序列分析（MMS）：考察了特定位点的化学结构变化及其对分子性质的影响
- 结构对比视图：提供两种化合物及其相关数据的并排比较
- 虚拟化合物：可使用R基团分析功能输出的虚拟化合物来填充R基团矩阵。通过枚举创建的虚拟化合物可与真实化合物一起分析，以便在项目推进过程中做出相应的决策



直方图直观展示了R2取代基的分析情况，X轴为取代基的化学结构，Y轴为数值

D360生物制剂研发工具

D360生物制剂研发工具支持对寡核苷酸、多肽、抗体以及ADC抗体-药物结合物等进行医学相关的序列比对和分析。生物制剂的序列-活性关系分析功能可帮助用户优化优化生物制剂。

寡核苷酸

D360提供的工具可以帮助深入理解寡核苷酸构成与其生物学表征之间的关系。基于HELM命名的可搜索性，可以对由单个序列（碱基）或多个相关子序列呈现的寡核苷酸进行筛选和相似度计算。寡核苷酸序列的格式化可以揭示序列-活性关系。

- 按组成和相似度搜索寡核苷酸
- 显示寡核苷酸序列和子序列
- 根据序列或相关子序列的组成，在比对位置进行序列格式化

多参数优化

所有诊疗研发项目中，关键的困难在于科学家是否有能力改进在研候选药物，使之拥有成为上市新药的生物特征。D360提供了一个灵活的打分函数，能综合考虑各种参数，平衡多方面因素，最终快速而有效地给出最佳的候选化合物或生物制剂。

多参数评分允许根据影响成为有价值治疗药物可能性的所有重要特性对候选药物进行评分。

按主要活性排序：
顶端化合物活性较差
(许多不佳表现/红色值)

按多参数得分排序：
顶端化合物具有理想的总体情况
(许多理想表现/绿色值)

蛋白和多肽序列处理能力

基于比对的多肽序列和短蛋白片段中提取的知识进行合理化设计，尤其要关注那些影响期望的生物活性特性的单体和基序上。可以对多肽序列进行比对和并按性质进行颜色标记，高亮显示序列存在差异的区域。通过序列-活性关系功能，可以达到优化生物属性的目的。

肽序列比对

将实验数据与多参数核心区块协同显示可提供序列-活性关系（SAR）。多肽序列比对查看工具提供了序列-活性关系的分析基础，它可以与一个参考序列进行比对，也可以两两之间相互比对。

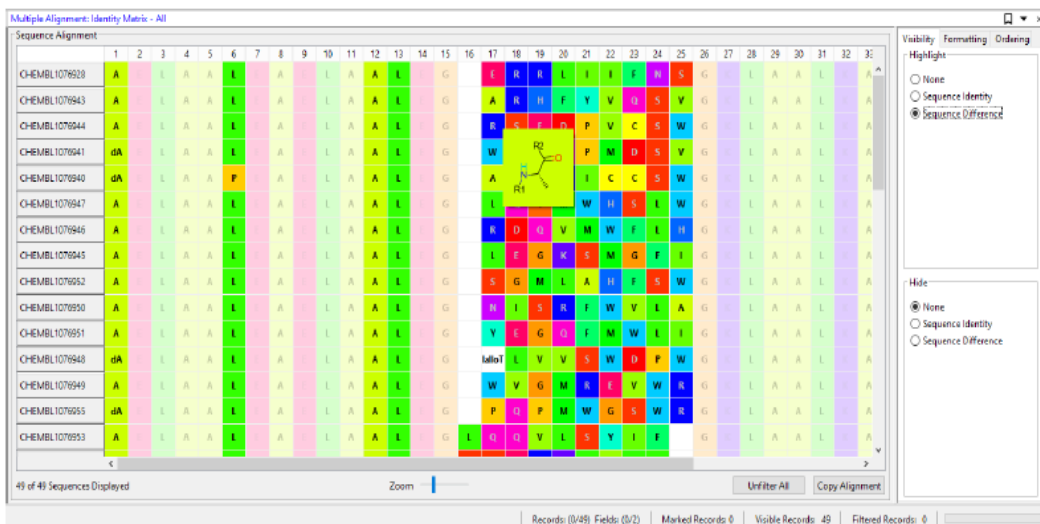
- 高亮显示序列比对结果的相似/差异区域
- 格式化以显示分子属性
- 在特定比对位置过滤残基
- 显示单体的原子水平结构

根据残基性质对多肽序列的多重序列比对结果进行着色。将鼠标停驻在单个残基上可以显示其原子水平结构。

“

D360提供医学相关的序列比对和分析，而传统生物信息学技术用于研究进化关系。这种差异在肽疗法的研发（不限于20种天然氨基酸）中至关重要。

”



“

D360极大地减少了我们为科学家获取数据所花费的时间和资源，真正使我们能够在更短的时间内做出关键的决策。

”

D360 Express

开箱即用的自助式信息学解决方案

D360 Express是专门为小型制药公司的研发人员设计的，此类公司的数据集成往往不需要企业级的解决方案。它提供了D360标准版中包含的小分子和生物制剂数据设计、访问、呈现和分析的全部功能。

快速、经济地运行

D360 Express使用标准连接器连接到数据源，可以快速部署，无需变更现有的IT基础设施，并且只需最低限度的IT支持。连接器可以对接来自BioVia、Core Informatics、IDBS、PerkinElmer等的数据库，也可提供针对非标准数据源的定制对接服务。

- 将来自商业数据源和公共数据库的化学和生物数据连接并整合到统一的中心化视图中
- 为数据查询、数据集、列表和注释等资源创建一个可分享的工作环境，由此产生一个自我维护的用户社区
- 在自助式环境中实时协作

D360 Capture-使用虚拟化合物加强设计

D360 Capture是D360的一个附加产品，它扩展了化合物设计功能，可以获取虚拟化合物作为设计化合物以供进一步优化。在标准D360查询中，虚拟化合物可以与真实化合物一起被检索、分析和注释，以便获取、评估和排序新的设计构思。

D360 Capture是对现有D360部署的补充：

- 直接从D360的集中存储库中获取新的化学结构构思
- 直接将获取的虚拟化合物集成到现有的D360设置中
- 使用标准查询将真实化合物和设计化合物检索至同一结果数据集中
- 使用相同的分析工具，在同一个数据视图中对真实化合物和设计化合物进行比较
- 使用D360的注释对设计化合物进行评注和安排合成优先级
- 通过直接访问或D360之外的网络服务，获取增强的额外数据

D360 Partner—简化数据安全访问和外部协作问题

D360 Partner是为外部合作伙伴提供的一项附加产品功能，它价格合理，能使数据和分析得以无缝、安全地共享，从而促进沟通和协作。D360 Partner为外部研究合作伙伴提供了一个专属的D360客户端，它可以安全地连接到申办方的D360主项目中。

- 外部合作伙伴与申办方共享相同的数据视图和分析工具，但不会访问到未经授权的数据
- 合作伙伴和申办方可以通过D360注释分享项目状态和想法
- 合作伙伴的身份与权限可以快速开通或调整

D360 Partner提供3个等级的数据安全性：

1. 完全禁止通过D360 Partner客户端访问D360数据目录和查询，以防止未经授权的数据访问
2. 不允许合作伙伴创建或调整数据查询或向数据集添加数据，以防止他们无意中访问数据
3. 数据视图由申办方创建，并以简单的D360仪表盘快搜小部件形式提供给外部合作伙伴

临床前安全存储

基于CDISC SEND的临床前研究数据存储库

临床前安全存储（PCSS™）是一个可查询的存储库。可以在该数据库中上传、验证临床前研究数据，并匹配基于CDISC SEND标准的术语。对于研究管理者、毒理学家、病理学家和数据科学家来说，当与D360结合使用时，PCSS是一个非常有价值的工具。PCSS插件利用现有的IT基础设施，支持多种文件格式，可连接到Provantis®、Pristima™和Watson LIMS™等第三方的平台。

为小分子、生物制剂、临床前转化研究提供更佳决策支持

D360科学信息平台包含的工具包和附加产品，除了数据检索外，还提供了众多先进功能。D360已经在许多公司成功部署：既有仅需要单一数据源访问的初创小型公司，还有需要综合的企业级数据集成解决方案的大型跨国制药企业。无论企业规模和需求如何变化，D360都证明了简单易用的数据访问和内置的数据分析工具可以加快对数据的洞察和深入理解。

“

D360 Partner是与外部合作者共享数据的完美解决方案。

”

关于Certara

Certara是领先的决策支持技术和咨询服务供应商，可协助优化药物开发和改善健康结果。Certara的解决方案从药物开发到患者护理生命周期，一应俱全，均使用最先进的科学建模和模拟技术以及监管策略，助力提升监管合规和商业成功的概率。Certara的客户遍布全球各地，其中包括上百家全球性生物制药公司、领先的学术机构和关键的监管机构。

如需更多信息，请访问www.certara.com.cn或发送电子邮件至sales@certara.com。

