

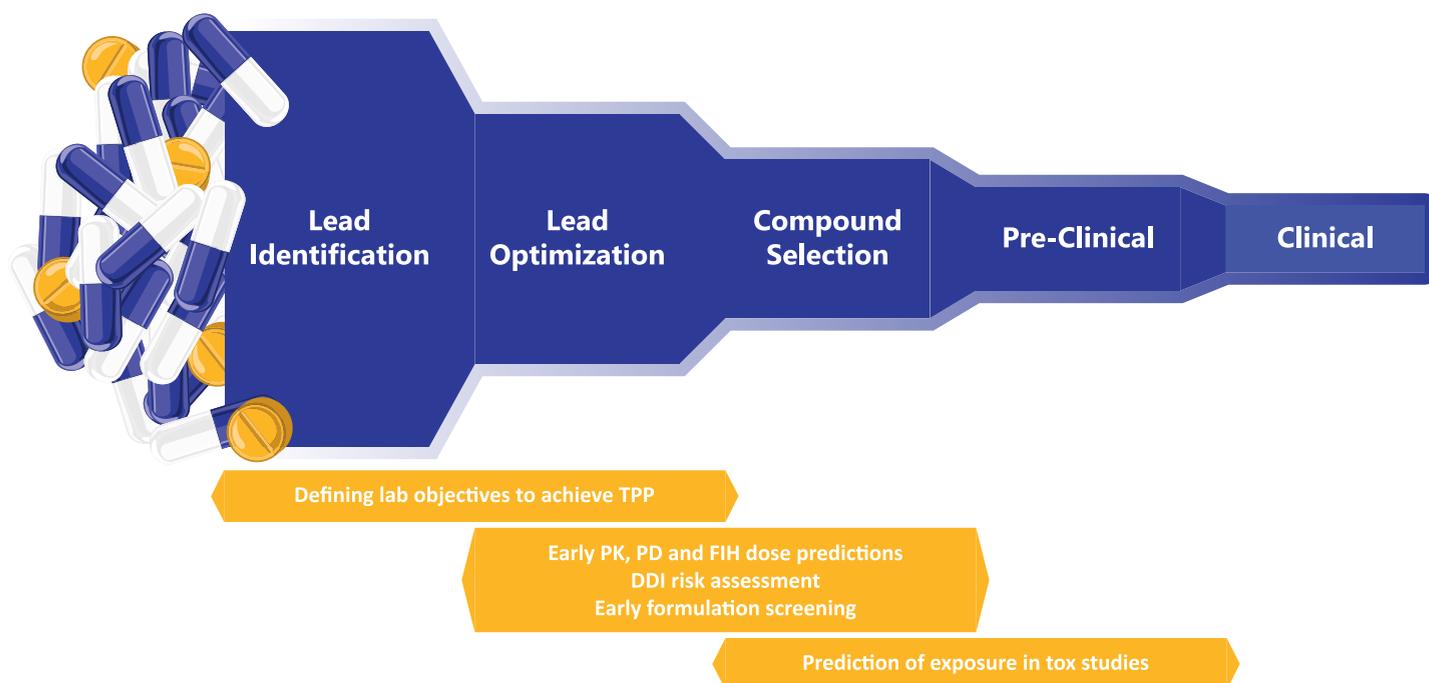
Simcyp™ Discovery 模拟器

增加 pre-IND 阶段和转化药物开发过程的决策信心

药物项目在早期开发阶段的流失率非常高，三分之二的临床前项目不能成功进入 I 期临床阶段。那么，我们应该如何更好地为转化研发决策提供信息，降低投资风险并帮助提高成功概率呢？

Simcyp Discovery 模拟器是一款专为药物发现与转化科学家量身定制的直观软件，可在新药临床试验申请前 (pre-IND) 和转化药物开发阶段提供决策信心。Simcyp Discovery 是一款基于生理药代动力学建模与模拟的软件，这是一种监管机构采用的多功能药物研发工具，有助于回答各种 “What if” 问题而不必进行临床试验。

Simcyp Discovery 是行业标准 Simcyp 模拟器的衍生产品，能够推进和加速小分子药物发现和转化研究进程。



TPP = target product profile; PK = pharmacokinetics; PD = pharmacodynamics; FIH = first-in-human; DDI = drug-drug interactions

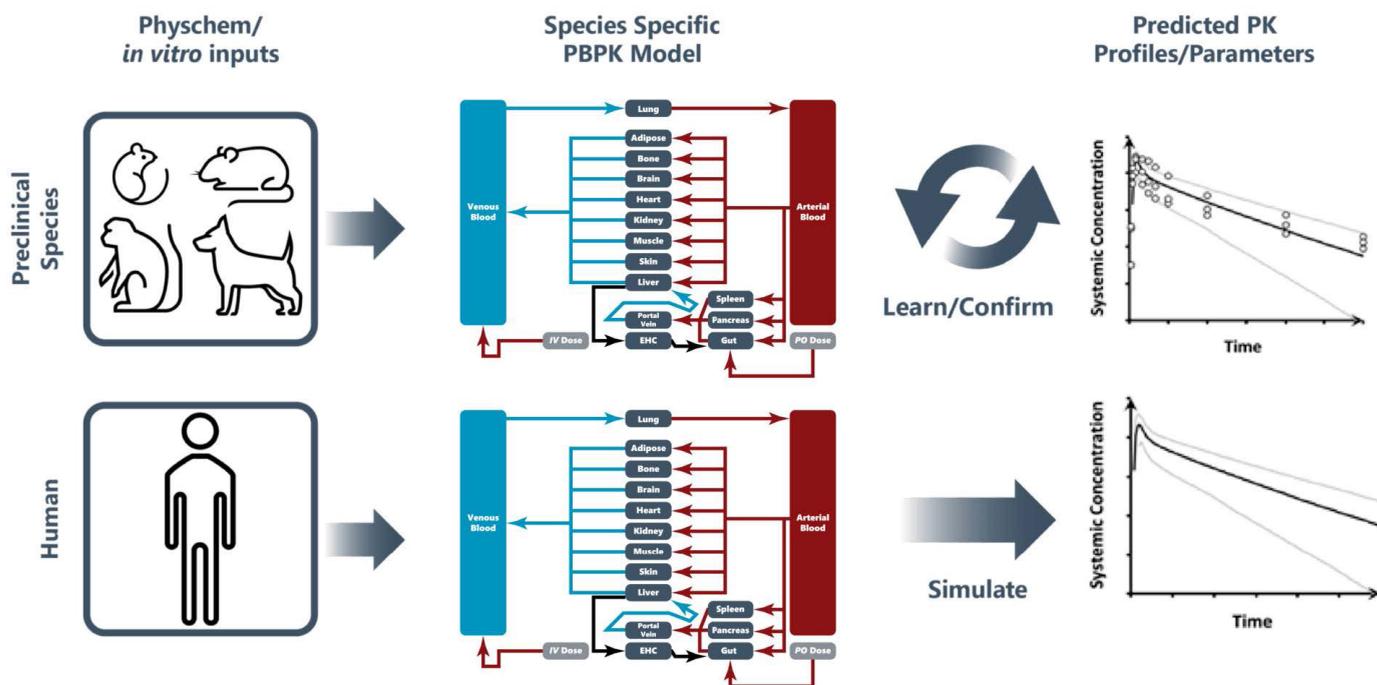
Simcyp Discovery 在药物开发早期阶段具有广泛的应用及诸多优势，其中包括 4 项主要用例。

首次人体试验 (FIH) 剂量预测

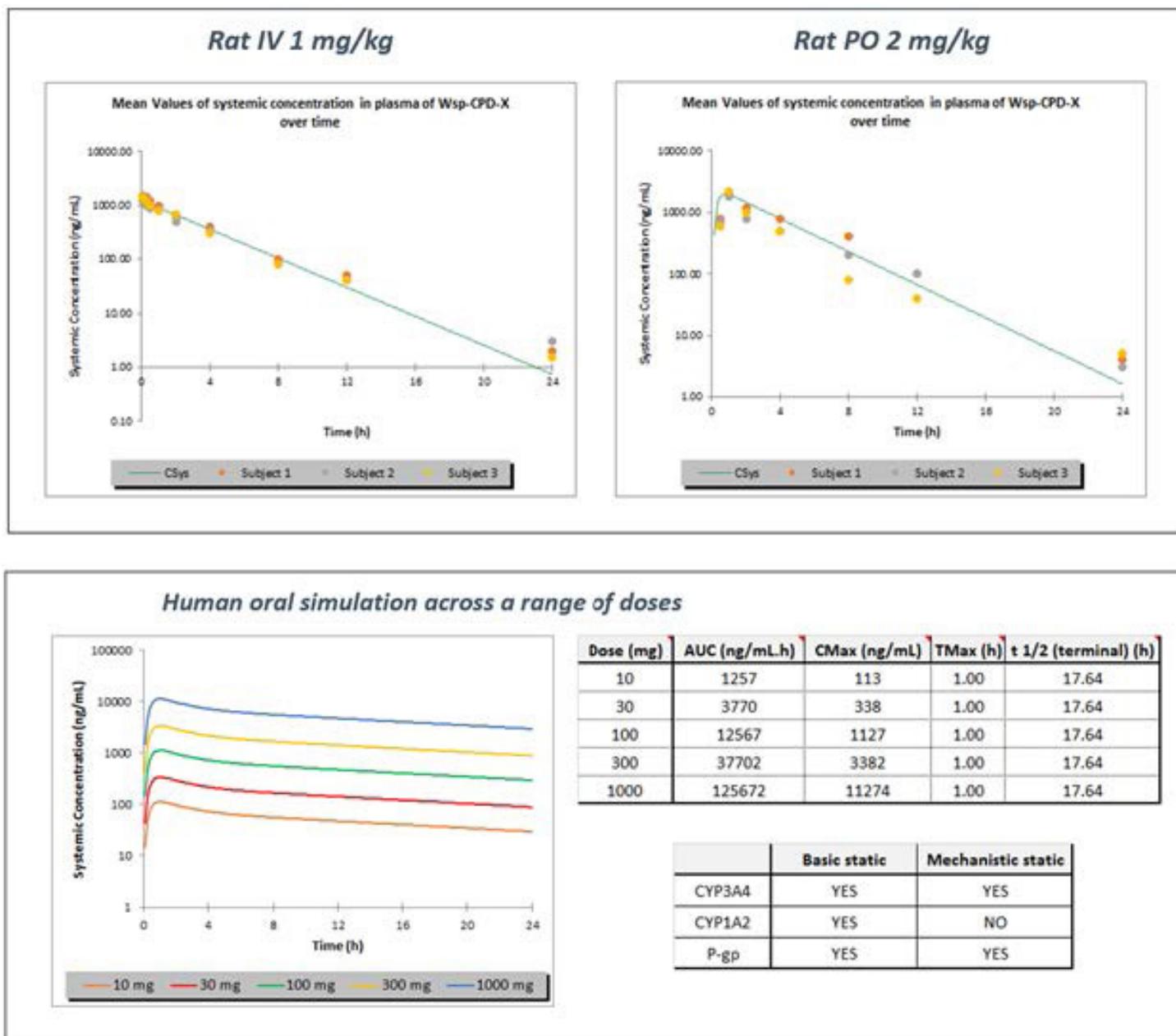
拟定的 FIH 剂量以及支持 FIH 剂量选择的有力理论依据是 IND 申请的重要组成部分。与 PBPK 模型相关的体外 - 体内外推法 (IVIVE) 可用于数据有限的早期阶段的 PK 与剂量预测。这能帮助我们机制性地理解生理变量所带来的影响。

- 可通过健康志愿者，小鼠，大鼠，犬和猴的 PBPK 模型来预测早期药物研发结果
- 化合物信息包括理化性质、血浆蛋白结合率、吸收率、溶解度、渗透率和清除率
- 人口数据包括人口学、组织血流量、组织成分、酶浓度、pH、药物转运时间和胃肠道不同区域的胆汁盐浓度
- 包括非房室模型分析和房室模型拟合分析，有助于实现模型参数化

Simcyp Discovery 建模策略



Simcyp Discovery 模型验证和 FIH 模拟



仅供举例说明使用

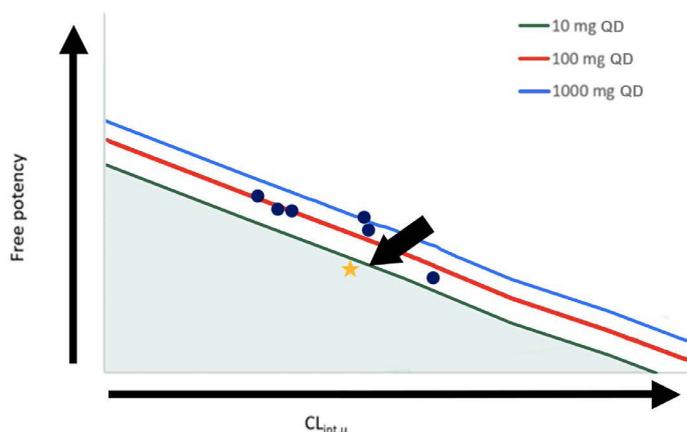
早期 DDI 筛查

药物相互作用是一个常见的临床问题，会增加不良事件风险和 / 或降低治疗效果。监管机构需要了解研发的药物与其他药物发生相互作用的潜在可能。Simcyp Discovery 可使用静态 DDI 计算器标记 DDI 风险。

化合物优先级与选择

在进入资金耗费更大的临床前和临床试验阶段之前，确定有望进行药物开发的候选药物是至关重要的一步。Simcyp Discovery 提供机制性的 PK 分析以帮助筛选、管线优化以及主候选药的选择。它支持无限高通量批量筛选，并可连接至 Certara D360 Discovery 信息学中心等数据库平台，以便在高通量模式下使用。Simcyp Discovery 有助于在药物研发过程中，指导确定一系列化合物中的最佳化合物应具备的实验室目标特性，以达到目标产品概况 (TPP)，该软件还能预测毒性研究中的暴露程度。

实验室目标定义



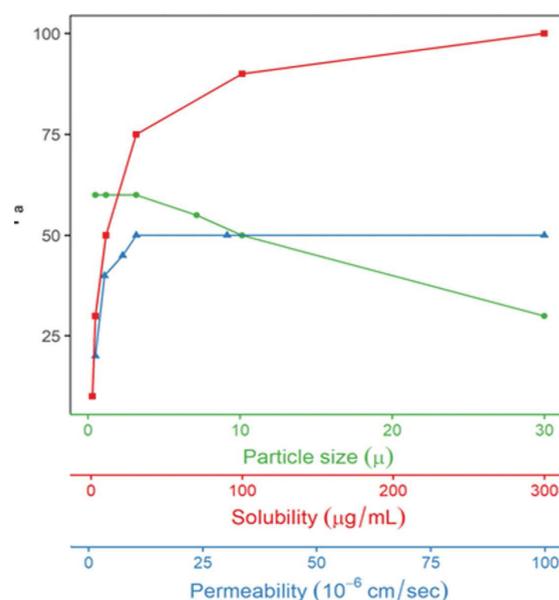
仅供举例说明使用

制剂研究

Simcyp Discovery 可以通过“预测、了解和证实”方法提供信息并加快制剂开发过程。借助这一方法，我们可以评估药物制剂的溶出和吸收特性，从而选出具有最佳药代动力学和药效学性能的制剂。

- 支持根据参照制剂（即静脉滴注、口服溶液等）的体内数据来预估 PK 参数
- 使用高级溶出、吸收和代谢 (ADAM) 吸收模型预测口服药物吸收率
- 支持模拟复杂的 PK 现象（例如非线性和时间依赖性 PK）

指导配方设计的敏感性分析



仅供举例说明使用

如需了解关于 SIMCYP DISCOVERY 模拟器的更多信息：

请通过 simcyp.support@certara.com 联系我们

请访问 <https://www.certara.com/simcyp-overview/simcyp-discovery/>



关于 Certara

Certara 运用专有生物模拟软件、技术及服务加速药物上市，为传统新药发现和开发带来变革。Certara 的客户遍布 62 个国家/地区，涵盖 2000 多家生物制药公司、学术机构以及监管机构。

如需更多信息，请访问 <https://www.certara.com.cn/>。

