

10月26日(火) ~28日(木)

Remo 会場

企業セッション

ES-01	(F-2) アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社.....	1
ES-02	(F-2) ダッソー・システムズ株式会社.....	3
ES-03	(F-3) SCSK株式会社/グラフィコア・ジャパン株式会社	5
ES-04	(F-3) コンフレックス株式会社.....	7
ES-05	(F-4) 株式会社Elix	9
ES-06	(F-6) ブルカー・ジャパン株式会社.....	11
ES-07	(F-6) 株式会社モルシス	13
ES-08	(F-7) パトコア株式会社.....	15
ES-09	(F-7) ドットマティクス株式会社.....	17

CBI学会2021年大会 企業セッション ES-01 (F-2)

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社

AWS 企業セッション (Remo会場 [Floor2](#))

オンデマンド配信

Session1 「AWSのご紹介」

AWSは世界で最も包括的で広く採用されているクラウドプラットフォームです。ライフサイエンス領域でも活用が進むAWSについてご紹介します。

Session2 「創薬研究領域における最新事例のご紹介」

国内外の創薬研究領域のお客様最新事例をご紹介します。

Session3 「創薬研究領域におけるAWS最新サービスのご紹介」

創薬研究領域でご利用いただけるAWSの最新サービスをご紹介します。



国内における製薬関連のお客様

(一部抜粋)



無料相談会

10/26 (火) 16:45 – 18:00

10/27 (水) 14:45 – 16:00

上記時間帯はAWSスタッフがブースに在席しておりますのでCBIセッションの内容に関わらず、お気軽にご相談ください。

こんなことでお困りではないでしょうか。

- ・クラウドに興味はあるが、創薬研究領域で何が出来るかよくわからない。
- ・計算環境のリソースが逼迫して、プロジェクトが進まない。
- ・属人的な作業が多くて、付加価値の高い業務に取り組む時間がない。

企業セッションタイムテーブル

10/26 (火)		10/27 (水)		10/28 (木)	
12:30 - 16:45	オンデマンド配信	12:00 - 14:45	オンデマンド配信	12:00 - 14:30	オンデマンド配信
16:45 - 18:00	無料相談会	14:45 - 16:00	無料相談会		
18:00 - 19:00	オンデマンド配信	16:00 - 19:00	オンデマンド配信		

その他のAWSセッション ※敬称略

AWSスポンサーセッション

■10/26 (火) 15:00 – 16:30 SS-13『新薬創出におけるクラウド活用の取り組み』

「AWSで実現する研究者のための創薬研究基盤」 原田 裕平 (アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社)

「中外製薬の創薬研究におけるAWS活用事例紹介」 荒川 晶彦、角崎 太郎、西藤 ゆかり (中外製薬株式会社)

■10/27 (水) 13:00 – 14:30 SS-22『構造生物学研究におけるクラウド活用の現在と展望』

「Amazon Web Servicesで創(はじ)めるクラウドHPC」 宮本 大輔 (アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社)

「KEK構造生物学研究センターにおけるクラウド利用」 山田 悠介 (高エネルギー加速器研究機構)

「AWS ParallelClusterをハブとした単粒子クライオ電子顕微鏡構造ベースの化合物スクリーニング現場のIoT化」
守屋 俊夫 (高エネルギー加速器研究機構)

プレナリー講演

■10/27 (水) 10:00 – 12:00 『データ駆動型創薬を加速するプラットフォーム』

座長:小長谷 明彦 (恵泉女学園大学)

P-04 「創薬研究におけるクラウド活用」 宮本 大輔/宇都宮 聖子 (アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社)

P-05 「創薬・化学研究におけるワークスタイル変革の現実解」 島田 祐三 (富士通株式会社)

P-06 「スーパーコンピューター「富嶽」時代の分子シミュレーション」 池口 満徳 (横浜市立大学)

AWS ヘルスケア・ライフサイエンスのご紹介ページ :

<https://aws.amazon.com/jp/local/health/>

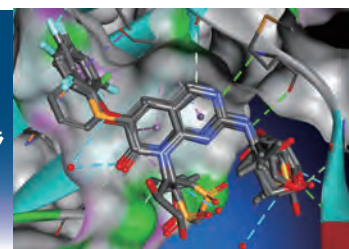


お問い合わせ先 :

<https://aws.amazon.com/jp/contact-us/>

BIOVIA Discovery Studio 2021

Discovery Studio 2021 は 2021 年にリリースされた一連の BIOVIA 製品のひとつで、今回も引き続きバイオセラピューティクスやシミュレーション、低分子研究などの分野における重要な科学的進展が実装されています。



【Discovery Studio 2021 に実装された新しい機能】

MSLD の作業がより快適に

- ・ 1 つのプロトコル (MSLD Bias Optimization and Production) に既存の 3 つのプロトコルを統合し、GPU 対応プラットフォームでシンプルかつ高度な CHARMM シミュレーションを実現
- ・ 1 回のシミュレーションでコンビナトリアル・ライブラリ全体の相対結合自由エネルギーを計算し、競合的結合アッセイを模倣
- ・ 大規模バリデーションにより、初期のリード最適化段階で大規模な同族化合物ライブラリを探索する本研究手法の精度を確認
- ・ 自由エネルギー摂動法 (FEP) よりも効率性が最大 20 倍向上

CHARMM-DOMDEC による FEP 計算に対応

- ・ 新しいプロトコル、CHARMM Relative FEP Calculations により、GPU 対応プラットフォーム (Linux) 上で両システム (リガンド系および複合体) の同時 FEP 計算が可能
- ・ 自由エネルギーを前進 (Forward) と後退 (Reverse) で予測
- ・ 終状態近傍でラムダの幅を狭めるカスタム・スケジュールを作成し、精度を向上させることが可能

原子タイプや力場のパラメータが追加

- ・ CGenFF を利用して低分子の原子タイプを階層的に指定する、精度と一貫性に優れたスキームを利用可能
- ・ 力場の結合パラメータや角度パラメータを拡張・改善し、CGenFF 力場を利用できるケミカルスペースを大幅に拡大

GPU 対応プロトコルにより、計算を高速化

- ・ Dock Proteins (ZDOCK) プロトコル: CPU よりも最大 13 倍高速
- ・ Dynamics (NAMD) and Solvate with Explicit Membrane プロトコル: 1 つの GPU で 8 コア CPU よりも 7 倍から 10 倍高速
- ・ MSLD Bias Optimization and Production プロトコル: グリッド・サーバーと非グリッド・サーバーの両方で動作
- ・ CHARMM Relative FEP Calculations (GPU): 新たに DOMDECGPU による FEP 計算をサポート

【Discovery Studio 2021 で強化された機能】

生物製剤の粘度や凝集の予測に関する機能が強化

- ・ Calculate Protein Formulation Properties プロトコルで Charge Map 表面や Aggregation Scores 表面を自動生成

タンパク質モデリング機能を多方面から強化

- ・ RCSB Structure Search: 従来の検索 API が 2020 年 11 月に廃止されたのを受けて、新しい JSON クエリをサポートするように
- ・ BLAST Search (NCBI Server): パフォーマンスと信頼性が向上
- ・ Analyze Protein-Ligand Complexes: 入力に複数のタンパク質を指定可能に
- ・ Predict Humanizing Mutations: パフォーマンスが向上し、生殖細胞系列ファイルの読み込みが容易に
- ・ Retrieve Antibody Templates from Database: 指定した抗体テンプレートをデータベースから取り込む際に利用できるサンプル・プロトコルが追加

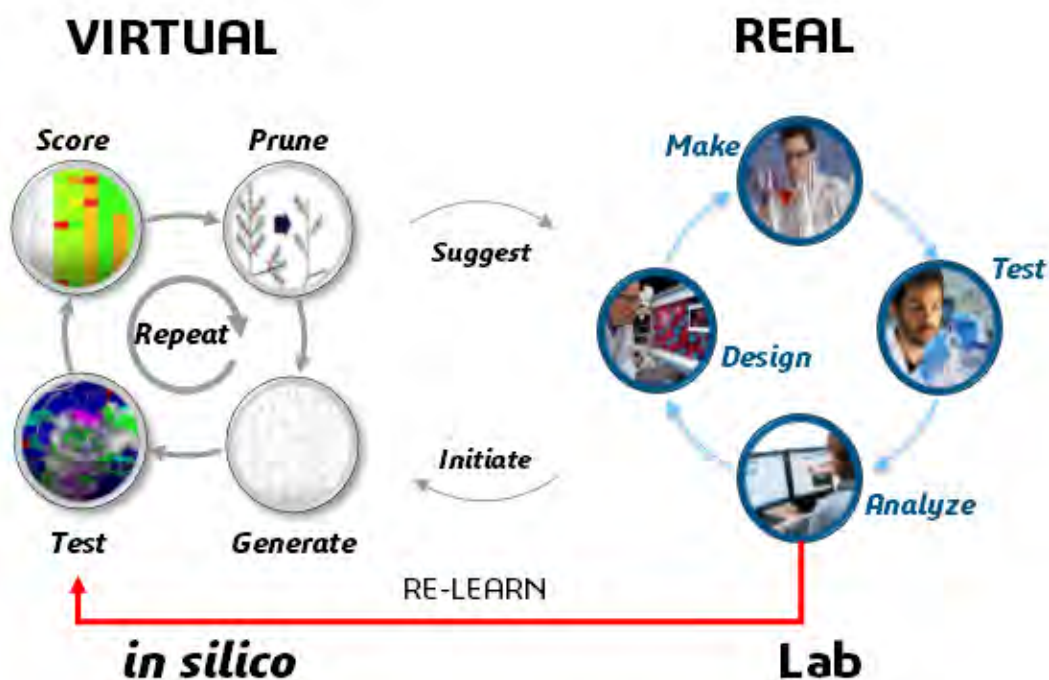
ファーマコフォア・モデリング機能を多方面から強化

- ・ リガンドベースのファーマコフォア・プロトコル、および Edit and Cluster Features ツールパネルで、非結合相互作用ファーマコフォア・フィーチャーがサポート
- ・ PharmaDB scPDB 受容体 - リガンド標的を更新し、非結合相互作用ファーマコフォア・フィーチャーが付加



リード化合物の最適化には平均5年で3000～6000化合物の合成が必要になります
ダッソー・システムズ BIOVIA は AI と機械学習で、この課題に取り組みます！

BIOVIA Generative Therapeutics Design (GTD) は、AI を活用し、合成する前段階でのリード化合物の最適化を支援します。バーチャルで化合物を発生・評価し、合成する化合物の選抜を自動的に行うことで、コストがかかる実際の合成を最適化します。



Generative Therapeutics Design を使ったイノベーションサイクル

GTD のイノベーションサイクルは、アクティブラーニングを使って新しい化合物をデザインすることで、バーチャルとリアル (V+R) でリード最適化を行います。AI や機械学習でバーチャルなリード候補化合物を選抜し、それを実際に合成し、テスト結果を使ってよりよい機械学習モデルを作成します。このサイクルは、目的活性だけでなくアンチターゲット、安全性、毒性など、すべての目的のターゲットプロファイルを満たすまで繰り返されます。

GTD を採用いただくことで、研究領域でのビジネス革新を実現し、探索フェーズの時間短縮、臨床段階での成功確率の上昇、結果として貴社に莫大なコスト削減をもたらします。

次世代AIプラットフォーム GRAPHCORE IPU

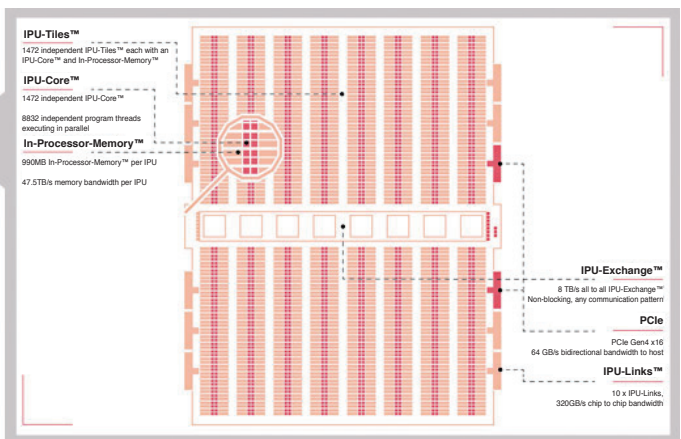
GRAPHCORE Intelligence Processing Unit

GRAPHCORE(グラフィコア)の第2世代Colossus™ MK2 IPUプロセッサ GC200は、機械学習ワークロードで最大の性能を発揮するように設計された新しいタイプの大規模並列プロセッサです。

GC200は最も複雑なプロセッサですが、GRAPHCOREが合わせて提供するPoplarソフトウェアとIPU-M2000プラットフォームにより、利用者は容易にAIのブレークスルーを実現することができます。



第2世代Colossus™ MK2 IPUプロセッサ GC200

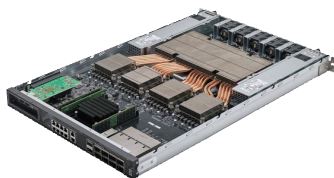


- 1472のプロセッサコアと8832の並列スレッドで実現するMIMDアーキテクチャ
- 900GBのIn-Processor Memory (SRAM)は47.5TB/sの超高速な帯域を提供

IPU-Machine:M2000

IPU-M2000は、第2世代IPUプロセッサGC200を4基搭載したGRAPHCOREの中核となるハードウェアプラットフォームです。

1Uシャーシに1ペタFLOPSのAIコンピュート機能、3.6GBのIn-Processor Memory (SRAM)、最大450GBのExchange Memory (DRAM)を搭載し、要求の厳しい機械学習ワークロードを処理します。ホストサーバやM2000同士の接続用に100Gbpsの高速・低遅延のインターフェイスを有しています。



IPU-Machine: M2000

4基のColossus™ GC200 IPU
1ペタFLOPSのAIコンピュート機能
最大450GBのExchange Memory™
2.8TbpsのIPU-Fabric™

各Colossus™ GC200 IPU

59.4Bnトランジスタ, TSMC 7nm @ 823mm²
250テラFLOPSのAIコンピュート機能
1472の独立プロセッサコア
8832の個別並列スレッド

IPU-Gateway SoC

Arm Cortex-AクアドコアSoC
超低遅延IPU-Fabric™ インターコネク

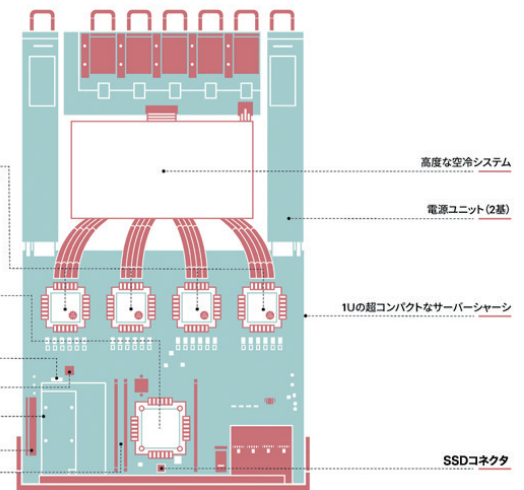
M.2コネクタ

ボード管理コントローラ

M.2スロット

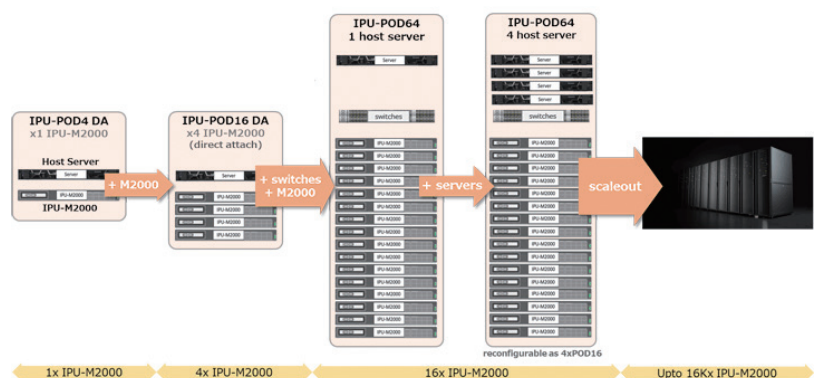
PCIe FH3/4L G4x8スロット
(RNIC/SmartNIC)

DDR4 DIMM DRAM x 2



スケーラビリティ

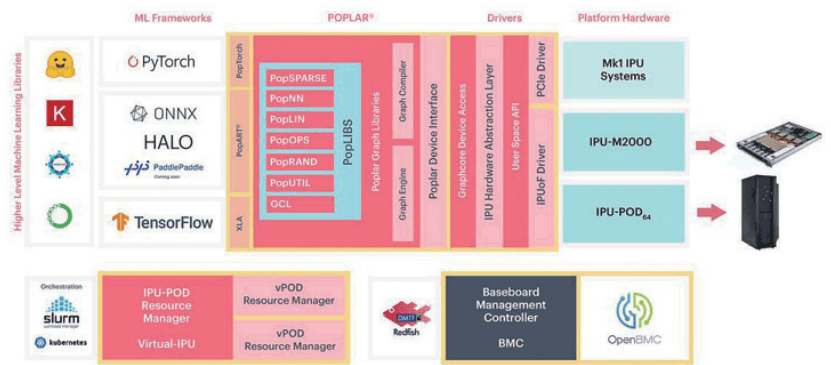
ホストサーバとIPU-M2000の1対1接続を最小構成とし、M2000 4台を相互接続したIPU-POD16、スイッチを介した16台構成のIPU-POD64と、需要に合わせて柔軟にシステムを拡張していくことができ、最大数千台といったスーパーコンピュータの規模まで拡張可能です。



Poplarソフトウェア

GRAPHCOREは、その革新的なIPUプラットフォームと合わせて、Poplarというソフトウェア群を提供します。Poplarがあれば、大規模なIPU環境でも、1台のマシンと同様の容易さで使うことができます。さらに、Poplarがすべてのスケーリングと最適化を行ってくれるので、ユーザはモデルとその結果に集中することができます。複数のユーザが異なるワークロードを同時に実行したい場合は、GRAPHCOREのVirtual-IPUソフトウェアを使い、AI計算を動的に共有することも可能です。

Poplarは、TensorFlow、PyTorch、ONNX、PaddlePaddleなどの標準的な機械学習フレームワーク、およびOpen BMC、Redfish、Dockerコンテナや、SlurmおよびKubernetesなどの業界標準のツールをサポートしているため、実用展開も容易です。



Poplarは、TensorFlow、PyTorch、ONNX、PaddlePaddleなどの標準的な機械学習フレームワーク、およびOpen BMC、Redfish、Dockerコンテナや、SlurmおよびKubernetesなどの業界標準のツールをサポートしているため、実用展開も容易です。

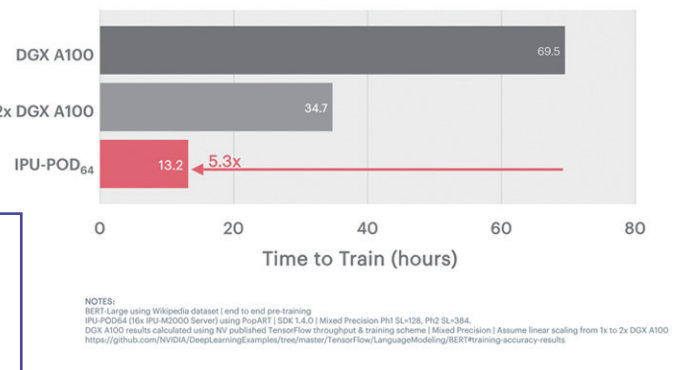
ベンチマーク

自然言語処理 - BERT

IPUは、様々な産業分野や事例において広く使われている各種の自然言語処理モデルにて非常に優れた性能を発揮します。BERT-Largeモデルでは、IPU-POD64は最新のGPUと比べて学習時間を大幅に短縮できます。

BERT-Large : TTT (time-to-train)

5.3x Faster Time To Train

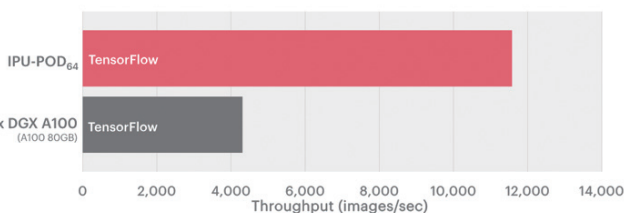


画像認識 - EfficientNet

視覚探索エンジンや医療用画像処理といった事例においては、できるだけ小さい遅延で高いスループットを実現することが重要です。EfficientNetのような、より高い精度と効率性を実現した新しいコンピュータビジョンモデルの学習と推論の両方において、IPUは比類のない性能を発揮します。

EfficientNet B4 : Training

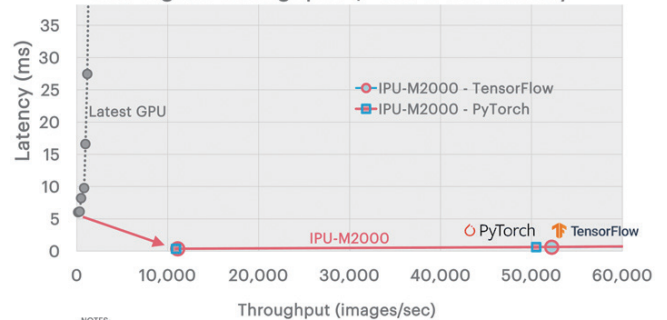
2.7x Higher Throughput for EfficientNet B4 Training



NOTES: (updated 19th Mar 2021)
EfficientNet-B4 | Real Data (ImageNet)
IPU-POD64 (16x IPU-M2000) results for TensorFlow | FP 16,32 | SDK 2.0.0 | results for G16-EfficientNet using Group Dim 16
DGX A100 80GB (16x A100-SXM4-80GB) using TensorFlow | Mixed Precision | assume 0.85x scaling from 1x to 2x DGX A100
A100 results published by NVIDIA <https://developer.nvidia.com/deep-learning-performance-training-inference-on-2nd-Mar-2021>

EfficientNet-B0 : Inference

>60x higher throughput | >16x lower latency



NOTES:
EfficientNet-B0 | headline comparisons using lowest latency
1x IPU-M2000 using TensorFlow & PyTorch | FP 16,32 | Synthetic | SDK 1.4.0 | Batch size 4 through 160 | Replicated scaling across IPU-M2000
No GPU results published on NV results website
1x Latest GPU using TensorFlow | Batch Size 1 through 512 | results measured using public Google repo | FP32 support only | Synthetic |
<https://github.com/tensorflow/tensorflow/tree/master/models/official/efficientnet/>



ITエンジニアリング事業本部 エンタープライズ第一部

豊洲本社 〒135-8110 東京都江東区豊洲3-2-20 豊洲フロント
TEL : 03-5859-3011 FAX : 03-5859-3085 URL : <https://www.scsk.jp>

西日本 北浜オフィス 〒541-0041 大阪府大阪市中央区北浜1-8-16 (大阪証券取引所ビル) TEL.06-6223-8800
中部 オフィス 〒460-0003 愛知県名古屋市中区錦2-16-26 (SC伏見BLDG.) TEL.052-209-7500
広島 オフィス 〒730-0012 広島県広島市中区上八丁堀4-1 (アーバンビュウグランドタワー) TEL.082-511-6700
九州 オフィス 〒812-0011 福岡県福岡市博多区博多駅前3-30-23 (博多管絃ビル) TEL.092-472-5800

●製品の内容は予告なく変更する場合があります。
●会社名および商品名は一般に各社の商標または登録商標です。

資料請求と価格のお問い合わせは… <http://www.clubscs.com/> または hpcteam-staff@ml.scsk.jp へ

CONFLEX 9

配座探索・結晶構造探索プログラム

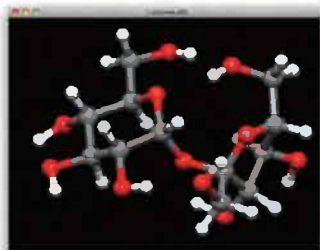
CONFLEXは、フレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけ出します。実践的に意味のある安定な配座異性体を優先的に創出することにより、効率的な配座空間探索を実現します。

CONFLEXの主な機能

● 配座探索

CONFLEXでは、分子内の環状部分と直鎖状部分を自動的に判別し、環状部分にはCorner FlapおよびEdge Flip、直鎖状部分にはStepwise Rotationを行うことで初期構造を創出して、それら全てに対して構造最適化を行い得られた配座異性体を保存します。

常にエネルギー的に安定な配座から初期構造を創出することにより、効率的な最安定構造探索を実現しています。



Rank	Energy (kcal/mol)	Energy (kJ/mol)
1	100.911	421.5611
2	191.306	794.6439
3	192.072	797.7990
4	192.127	798.1992
5	192.164	798.6923
6	192.613	802.6240
7	192.676	803.4425
8	192.96	805.1040
9	193.452	806.6580
10	193.557	807.5110
11	193.579	807.5321
12	193.608	807.5956
13	193.624	807.6848
14	193.724	808.4182
15	193.878	809.3959
16	193.923	809.7976
17	193.954	810.2822
18	194.032	810.2475
19	194.045	810.2423
20	194.085	810.2259
21	194.096	810.2223
22	194.171	810.1958
23	194.175	810.1944
24	194.216	810.1844
25	194.245	810.1569
26	194.327	810.1506
27	194.397	810.1338
28	194.407	810.1315

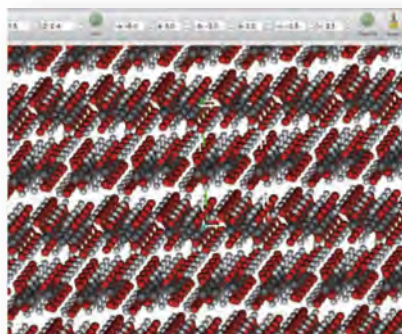
● 結晶構造最適化/結晶構造探索

分子構造データと空間群の対称性を入力することで、自動的に結晶構造を作成して構造最適化を行ない、エネルギー極小に位置する結晶構造を網羅的に算出します。

最適化した一連の結晶構造に対して、エネルギーの低い順に並べるだけでなく、あらかじめ用意した粉末回折データに近い順に並べることもできます。

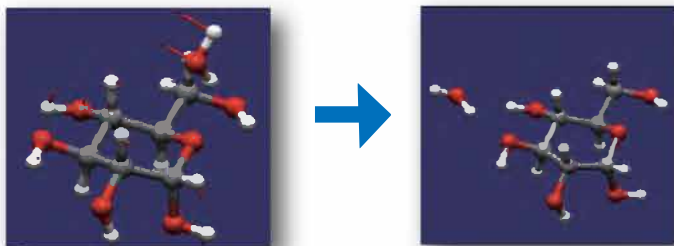
● 粉末X線回折データの出力

結晶構造の粉末回折データを算出し出力します。X線源の元素や波長を変えることも可能です。



● Dynamic Reaction Coordinate (DRC)

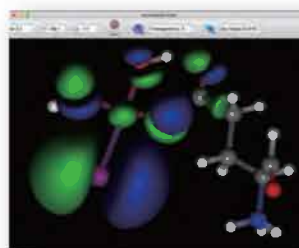
基準振動モードを使用して初期速度ベクトルを算出し、動力学計算を行う計算方法です。複数分子の配置変換や、大きな分子の配座変換に適用できます。



● Gaussian呼び出し機能

同じマシンにGaussianがインストールされている場合、CONFLEXからGaussianを呼び出して、構造最適化および配座探索計算を直接行うことができます。

分子力場パラメーターの無い分子や、古典力場では扱えない電子状態での構造最適化・配座探索が可能です。



ファイルフォーマット

- mol – MDL Molファイル
- mol2 – Sybyl mol2ファイル
- sdf – MDL SDファイル
- pdb – Protein data bankファイル
- cmf – 結晶構造ファイル
- cif – 結晶構造ファイル

分子力場

- MM2
- EMM2
- MM3
- MMFF94s
- Amber

動作環境

- OS: Windows 10
 macOS 10.14, 10.15
 CentOS(CONFLEX) 7.6 – 7.9
 8.0 – 8.3
 CentOS(Interface) 7.6
 OpenGL: Version 3.3 以上
 CPU: 1.0GHz以上
 ディスク: 40GB
 メモリー: 256MB以上

コンフレックス株式会社

〒108-0074
 東京都港区高輪3-23-17
 品川センタービルディング6F
 TEL: 03-6380-8290
 FAX: 03-6380-8299
 Email: info@conflex.co.jp
 http://www.conflex.co.jp/

CONFLEX Global
 Email: cust-info@conflex.net
 http://www.conflex.net/

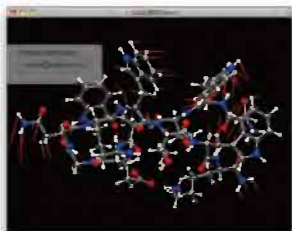
CONFLEX
 HIGH PERFORMANCE
 Conformation Analysis

CONFLEX 9

配座探索・結晶構造探索プログラム

● 構造最適化と基準振動解析

構造最適化で得られた極小構造に対して、自動的に基準振動解析を行います。基準振動解析により得られた振動モードの表示、およびGibbsの自由エネルギーなどの熱力学的諸量を算出します。構造を部分的に固定して最適化することも可能です。



Frequency (cm ⁻¹)
1 11.36
2 13.86
3 16.58
4 17.82
5 23.57
6 25.47
7 27.28
8 28.77
9 31.29
10 35.46
11 37.91
12 38.96
13 40.8
14 41.46
15 42.28
16 44.45
17 46.3
18 47.58
19 48.22
20 49.9
21 52.87
22 56.82
23 57.91
24 58.9
25 59.43
26 61.27
27 62.54
28 64.12

● 溶媒効果

GB/SAモデルを用いた計算が、構造最適化、振動解析及び配座解析まで可能です。また、LogP値を自動的に算出することが出来ます。

● パラメーター設定

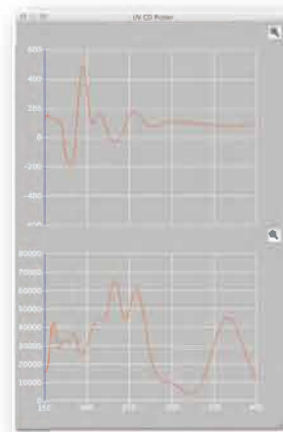
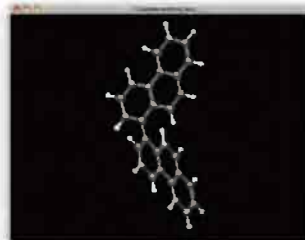
CONFLEXに含まれている力場パラメーターに対応していない原子タイプを含む分子について、パラメーターを追加して計算することができます。既存のパラメーターを修正して計算することも可能です。MMFF94s力場のみの対応です。

● ホストリガンド配位探索

複数の分子を含む系について、ある一つの分子が他の分子(群)に対してどの位置にどのような向きで配位するのが安定かを探索します。二量体や錯体の安定構造の探索に利用出来ます。

● CD/UV/Visスペクトル解析

CONFLEXで得られた配座異性体についてCD/UV/Visスペクトル計算を行うことが可能です。



CONFLEX Interface

● 読み込み可能なファイル

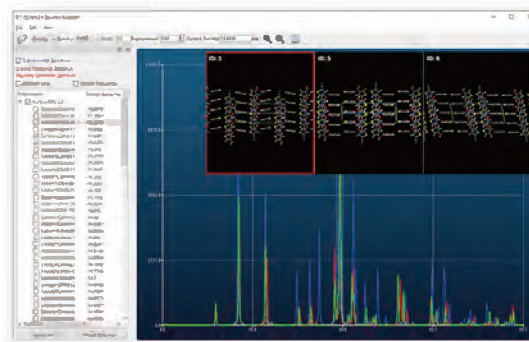
- MDLファイル: .mol, .sdf
- Gaussianチェックポイントファイル .fchk
- CONFLEX出力: .bso, .nmr
- GAMESSログファイル
- 多構造ファイル: .sdf
- Fireflyログファイル
- PDBファイル
- Sybyl mol2ファイル
- 結晶構造データ: .cif, .cmf
- ChemDrawからのカット&ペースト

● 分子の操作

- 結合多重度の修正
- 原子間距離に基づく、自動結合生成
- 原子の形式電荷の設定

● 分子・結晶構造の表示

- 表示形式: line, ball & stick, CPK
- 3Dでの分子の回転、ズーム表示
- 結合距離、結合角、ねじれ角の表示
- 結晶面の表示
- 基準振動、DRCのアニメーション表示



● 計算の設定と実行

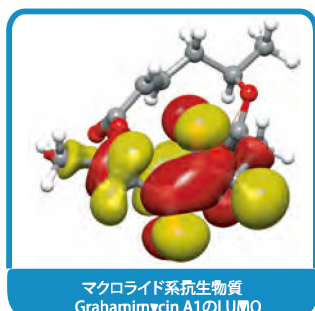
- 入力ファイルの作成
- ネットワーク経由でのジョブの実行
- 溶媒効果の指定と溶媒計算のパラメーターの指定
- 設定テンプレートの保存機能
- 頻繁に使用するキーワードの簡易設定

● 計算結果の表示

- 結合長、結合角、ねじれ角の表示
- 探索後の各配座の表示
- 基準振動解析結果のベクトル表示
- スペクトルグラフの表示: IR, NMR, CD, UV-Visible, など
- 分子軌道および電子密度の表面表示
- Gaussianによるスペクトル計算結果の存在確率に沿った重ね合わせ
- 表計算機能

● 外部プログラムとの連携

- Gaussianなどの計算実行
- ChemOfficeからの計算実行



Atom	Occupancy	YMO	LUMO	YMO	YMO
Atom ALA_PHE_0001.PHE	-0.63327138	1.809354137-01	0.864268561		
Atom ALA_PHE_0002.PHE	-0.71532277	0.619471285-01	0.165379462		
Atom ALA_PHE_0003.PHE	-0.71532281	1.619471285-01	0.165379462		
Atom ALA_PHE_0004.PHE	0.56884516	1.78807787E-01	0.558712385		
Atom ALA_PHE_0005.PHE	-0.62490133	1.00438482E-01	0.557928615		
Atom ALA_PHE_0006.PHE	-0.8500895	1.65352407E-01	0.57043936		

株式会社 Elix は 「創薬を再考する」をミッションとした AI 創薬企業です。



優秀な AI リサーチャー・AI エンジニアに加え、化学・生物学・物理学等の異なる専門性を持つ、博士号取得者多数を含むメンバーで構成されています。会社の公用語を英語とし、10 カ国以上の異なる国からトップクラスの優秀なメンバーを集めることにより、高い研究開発力・技術力を実現しています。

SESSION

10月26日|火| 15:00-16:30 zoom ブレイクアウトルーム (SS-11)

01 Building an AI Drug Discovery Platform at Elix, Inc.

This presentation will introduce the modular architecture of the Drug Discovery Platform, and the capabilities of each module, including state of the art graph models for prediction, custom implementations of leading generative models, and the mechanics of active learning for experimental data collection.

登壇者 株式会社 Elix Casey Galvin



02 Target Discovery in the age of Big Data and AI

We will review the recent progress in the field of target discovery/optimization using ML, discuss the challenges and potential insights into future progress in the field.

登壇者 株式会社 Elix Nazim Medzhidov



03 Towards Generating Synthesizable de novo small Molecules

This talk will briefly discuss about the advantages and disadvantages of two different paradigms of approaching generation of de novo small molecules.

登壇者 株式会社 Elix Jun Jin Choong



※講演内容が変更となる場合がございます。

招待講演

10月26日|火| 13:00-14:30
「Elix における AI 創薬と
最新動向」

登壇者：株式会社 Elix CEO 結城 伸哉
開催場所：I-02

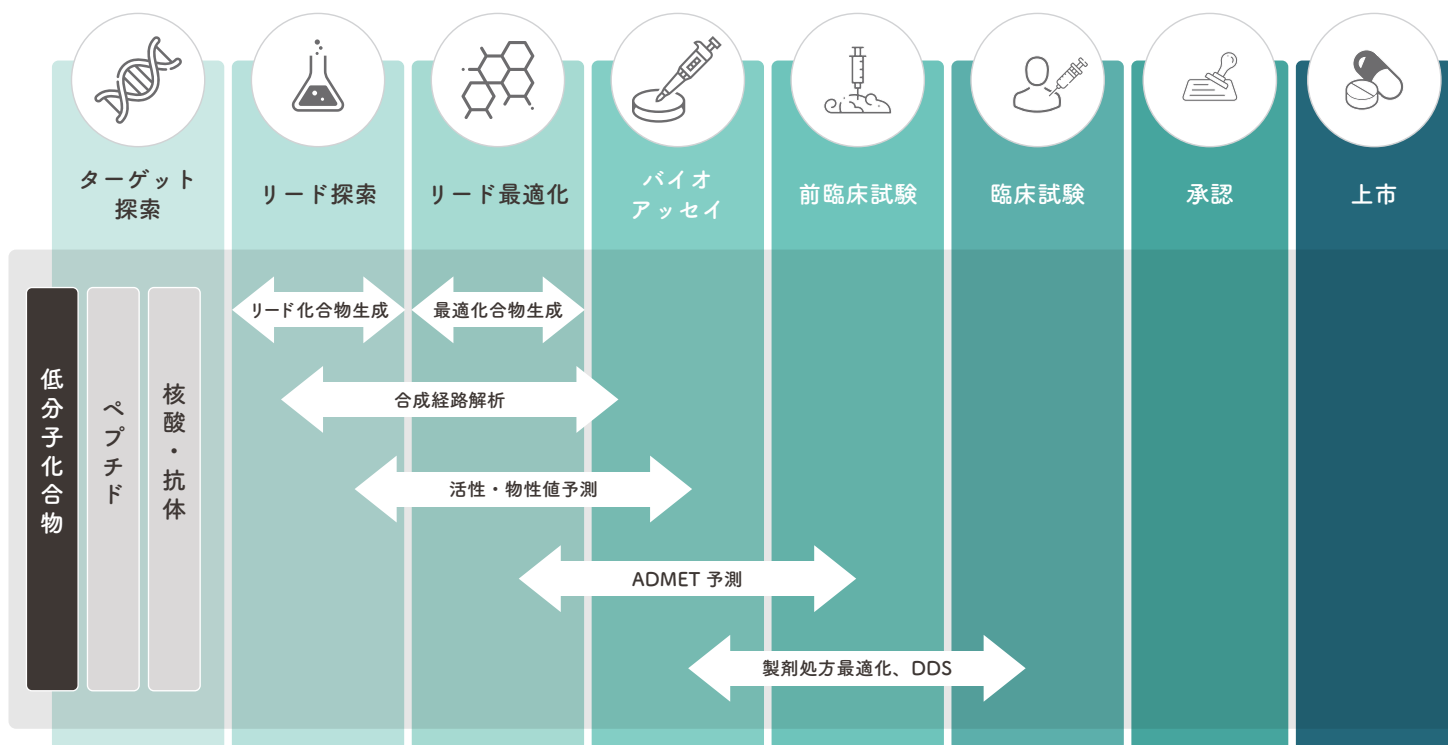


同時出展 企業セッション

全日程 12:00～
Elix の AI 創薬プラットフォームの紹介

開催場所：Remo ブース (ES-06)

ヒット化合物の探索から候補化合物の創出まで Elix の全ての技術を結集したプラットフォームを提供



これらの技術を活用した共同研究も好評をいただいております。

FEATURE Elix の特徴

高い技術力

最先端の独自技術で数多くのモデルを保有。

豊富な実績

トップクラスの企業、研究機関、大学との実績と信頼。

ノウハウの提供

秘密主義の企業が多い中、透明性を重要視し、一貫通貫でサポート。

主要取引先



他多数の製薬会社様と取引実績がございます。

研究機関



採択プログラム



お気軽にお問い合わせください。お待ちしております。

株式会社 Elix 〒102-0081 東京都千代田区 四番町 8-34 第2 東郷パークビル3階
elix-inc.com/jp/ info@elix-inc.com





Arxspanシステム

● クラウド型次世代研究情報管理システム

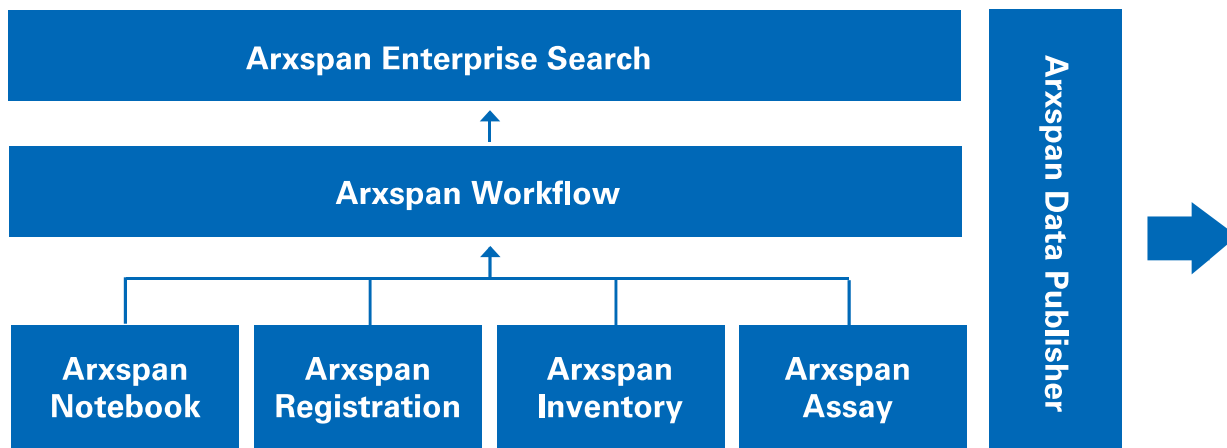
Arxspanは、Notebook、Registration、Inventory、Assayにより構成されているオールインワンのクラウド型次世代研究情報管理システムです。自社研究データ管理はもとより、近年増加傾向にあるCROへの委託業務やアカデミアとの共同研究等社外パートナーとの協業業務に対し、クラウドの利便性を最大限活用し迅速なシステム展開・データ共有・データ回収に貢献します。

研究開発部門では、業務フローに基づき様々な依頼が発生します。依頼発信後も依頼内容の変更優先順位変更等の発生により、最新情報に基づくリアルタイムな進捗状況管理は業務効率化の重要な鍵となります。

Arxspan Workflow

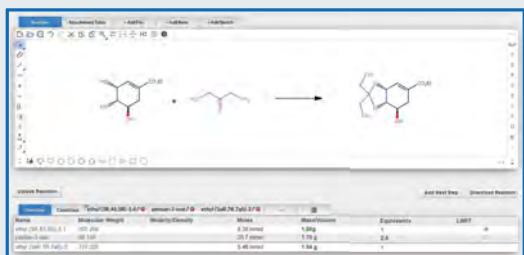
研究開発業務にて発生する多様な依頼を管理する機能を製品化したものが、Arxspan Workflowです。

- 合成依頼、評価依頼、分析依頼等、社内外依頼管理を一元管理
- 依頼を「Request Type」として、自在に管理画面を設計
- 多彩なデータタイプをサポート
- Request Type 毎に、新規依頼作成時、変更時の通知を詳細に設定可能
- Request Type は、Request Type 毎、全社もしくはグループ、個人単位で運用可能 他



Notebook

- 標準テンプレート(合成, 生物, 分析, 着想)
- カスタムテンプレート
- Auto Text機能
- CFR Part11準拠 監査証跡機能 他



Registration

- 登録物を自在に定義
 - 低分子, 中分子, 高分子, 蛋白質, セルライン, ID自動発番
- 登録物質毎にアクセス権設定(個人, グループ単位)
- 登録IDの付番, 同一物質条件の設定, 重複物質チェック
- Standardizerによる構造正規化機能
- バルク登録機能 他

Registration ID	Substance Name	Structure	Access Rights
12345	Example Substance	[Chemical Structure]	Admin, User

Inventory

- 管理物質を自在に定義
 - サンプル, 試薬, プレート, セルライン, 抗体他
- 管理場所, 管理体系をエクスプローラの様子に自在に設定
- フォルダー毎にアクセス権設定(個人, グループ単位)
- 登録から破棄までの監査証跡
- バルク登録機能 他

Bottle

Chemical Name: N,N-dibutylethylenediamine

Mol Weight: 129.247

Mol Formula: C₁₀H₂₂N₂

CAS Number: 7037-69-5

Amount Remaining: 50

Amount Used: 0

Inventory: 99

Container Name: N,N-dibutylethylenediamine

Barcode: 304797999

Assay

- 登録テンプレート設定機能
- カーブフィッティング機能
- IC50, EC50等各種計算機能
- ヒートマップ機能 他

	0.022	0.088	0.296	0.817	2.079	DMSO	1.001	0.888	10.00	50
10410	34760	38270	35410	37330	35990	30010	20750	20850	21100	15450
33089	98.08	85.98	104.6	85.8	92.7	86.7	32.52	31.05	33.08	22.7
37890	94.19	92.42	88.4	86.8	100	85.82	35.23	36.93	37.98	25.21
31530	92.06	87.8	22.43	9.73	100	78.28	3.96	4.08	4.21	10.52
25430	95.08	83.08	10.51	9.32	100	86.8	7.03	3.97	4.36	10.16
10540	91.04	86.77	86.84	100	82.72	30.04	33.97	34.19	31.88	19.20
15550	94.21	88.78	34.52	38.88	100	81.43	33.17	36.18	38.09	30.09
9400	13780	15400	15020	10170	15050	17210	14810	12130	9590	7480



Data Publisher

- Arxspan内指定データを、ユーザ指定サーバーにアップロード
- Arxspan内データ更新時に、自動データ転送
- ユーザ管理者による、Arxspan内指定データの変更機能 他

● ブルカージャパン株式会社

バイオスピン事業部
 info.bb.io.jp@bruker.com
 www.bruker.com

本社(横浜営業所)
 〒221-0022
 神奈川県横浜市神奈川区守屋町3-9
 TEL: 045-444-1390

モルシス 企業セッション

Online

弊社ブース内で取扱い製品の機能と応用事例について紹介します。

- 統合計算化学システム MOE の各種アプリケーション例
- タンパク質立体構造管理システム PSILO の機能と利用事例
- 創薬研究支援ソフトウェア BioSolveIT 製品の低分子創薬アプリケーション例
- 研究情報管理ソフトウェア各製品の機能と特長
- データ駆動型システム CLARITY & Clarity PV の機能紹介
- ゲノム解析関連製品の NGS 解析技術とデータベースの活用例

10月26日(火)

12:15 - 12:45

タンパク質立体構造データベース PSILO のご紹介

公共データと社内データを統合的に管理し、PDB ファイルの全文検索、3D 相互作用検索、ポケット類似性検索、重ね合わせなどの機能を提供します。

次世代シーケンサー解析ソフトウェアのご紹介

13:00 - 13:20

次世代シーケンサーデータ解析ソフトウェア Partek Flow のご紹介

リード配列のマッピングから統計解析、可視化、生物学的解釈などが可能な機能を提供します。

13:40 - 14:00

遺伝子発現データベース GENEVESTIGATOR のご紹介

公共データベースに登録された遺伝子発現データをキュレーションすることで、大量の実験データを統合して解析することが可能です。

研究情報管理システムのご紹介

15:00 - 15:20

研究情報共有システム CBIS のご紹介

様々な分野の研究情報を管理・共有できるシステムです。セミオーダー型開発で、要望に合わせたシステムを短期間で提供可能です。

15:40 - 16:00

統合情報プラットフォーム Sciligence 製品のご紹介

多様な創薬モダリティに対応する研究情報統合プラットフォームです。低分子から生体高分子、ADC などの複合体までシームレスな取り扱いが可能です。

16:20 - 16:40

創薬研究情報共有クラウドシステム CDD Vault のご紹介

サンプルとアッセイ情報の管理、および電子実験ノートのクラウドサービス (SaaS) です。化学/生物学の分野・所在地・組織の壁を越えて研究者間のコラボレーションを促進します。

MOE バイオロジックス アプリケーションのご紹介

17:00 - 17:20

MOE ペプチドモデリング

環状ペプチドの配座解析、物性予測、相互作用解析を中心に解析事例を紹介します。

17:40 - 18:00

MOE 抗体モデリング

抗体モデリング、抗原との相互作用解析、Developability の評価について事例紹介します。

18:20 - 18:40

MOE 核酸モデリング

核酸モデリングと分子間相互作用解析を利用した解析事例を紹介します。

10月27日(水)	
12:15 - 12:45	Chemotargets CLARITY のご紹介 薬理活性および安全性予測のためのデータ解析および可視化プラットフォームです。4700以上のターゲットに対する薬理活性予測や、1200以上の毒性エンドポイントの予測が可能です。
次世代シーケンサー解析ソフトウェアのご紹介	
13:00 - 13:20	Partek Flow のご紹介 (10月26日と同じ内容です。)
13:40 - 14:00	GENESTIGATOR のご紹介 (10月26日と同じ内容です。)
研究情報管理システムのご紹介	
15:00 - 15:20	CBIS のご紹介 (10月26日と同じ内容です。)
15:40 - 16:00	Scelligence 製品のご紹介 (10月26日と同じ内容です。)
16:20 - 16:40	CDD Vault のご紹介 (10月26日と同じ内容です。)
BioSolveIT 製品 低分子創薬アプリケーションのご紹介	
17:00 - 17:20	ケミカルスペース高速探索ツール infiniSee 10 ¹⁰ 個を超える巨大なケミカルスペースの中から構造検索を行うツールです。新規構造、SAR展開、特許を回避した構造など、購入可能な候補構造を簡単な操作で即座に発見できます。
17:20 - 17:40	SBDD 統合ツール SeeSAR 実験研究者が直感的にSBDDを行うための統合ツールです。結合親和性予測、ドッキングシミュレーション、結合部位中の分子編集、母核置換、物性推算等の分子設計機能を搭載しています。
MOE 低分子創薬アプリケーションのご紹介	
18:00 - 18:20	MOE AutoQuaSAR 化合物と実験値のみから簡単な操作で多様なQSARモデルを構築するツールです。
18:20 - 18:40	MOEsaic 低分子のSAR/MMP解析を行うためのMOE/webアプリケーションです。

10月28日(木)	
12:15 - 12:45	Chemotargets Clarity PV のご紹介 ファーマコビジランスと橋渡し安全性研究のための知識ベースです。各医薬品に対して、安全性薬理学、前臨床毒性、臨床安全性、上市後の安全性情報を整理して見やすく表示します。
MOEの開発言語 SVL で作成したカスタムアプリケーションのご紹介	
13:00 - 13:20	MOE Quick Federated Structure Search (QFSS) 複数の化合物ライブラリーから高速かつ横断的に構造検索を行うツールです。
13:30 - 13:50	MOE PROTAC Modeling Tools PROTAC・標的タンパク質・E3リガーゼの三元複合体のモデリングツールです。
14:00 - 14:20	MOE Extension for KNIME KNIME上からMOEを利用するためのノード群です。新規ノード開発にも対応しています。

◆ アンケートに回答頂いた方には説明資料を差し上げます。

[アンケートリンク](#)



株式会社モルシス ライフサイエンス部
TEL: 03-3553-8030 E-mail: sales@molsis.co.jp
<https://www.molsis.co.jp/>

詳しくは企業セッションにてお問合せください

①データ駆動型・化合物設計プラットフォーム Design Hub

テレワーク中や共同研究先の研究者がグローバルに広がる今日の研究チーム。様々な情報ソースからのデータで、化合物デザインの現場は混沌としています。仮説から開発候補の選定までを支援する「化合物設計のプラットフォーム」は、デザインに関する情報を一元的に管理し、チームによる化合物デザインを支える「場」となります。データに基づく合理的なディスカッションと意思決定がスムーズに進められます。

コラボレーションを促進

シームレスなデータ連携

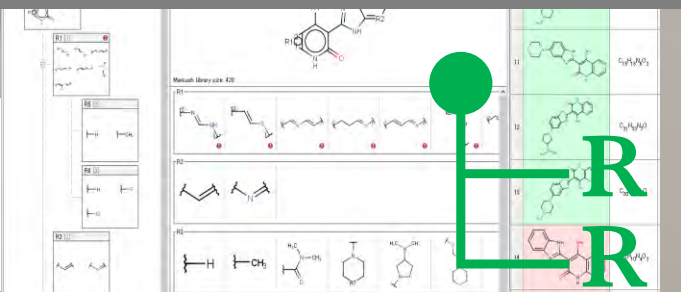


②強力なクレームの作成をより簡単に！ Markush Editor

全く新しい化学特許の作成方法で**強い特許**を！

Markush Editor

- 3つの主要機能で特許作成ワークフローに対応
- ✓ 構造群からマーカッシュ構造の自動作成
 - ✓ マーカッシュスペースへの該非チェック
 - ✓ 請求項自動作成機能



化学構造式からHSコードを瞬時に特定

➤ この物質のHSコードを簡単に知りたい！

- 正式なIUPAC名やCAS番号がわからなくても特定できます。
- 新規の化学物質でも、構造式さえあれば、HSコードを特定できます。
- 複数構造の一括チェックが可能です。

➤ 対応国・地域

米国 (HTS:Harmonized Tariff Schedule B) / スイス / EU (欧州連合)

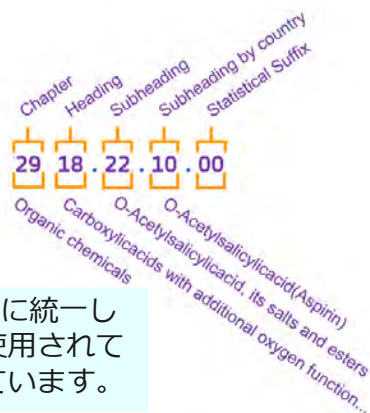


HS single check summary

Checked structure: 91406-7
Against countries: European Union, Switzerland, United States of America, US Schedules
Max atom count: 200
Checked at: Aug 21, 2023, 11:27:11 AM
Knowledge base version: 21.05.14.0

Country	HS code	HS description
Switzerland	2929 19 3000	Compounds with other nitrogen function, unspecified
Switzerland	2929 19 3000	Other
US Schedules	2929 19 3000	Compounds with other nitrogen function, unspecified
US Schedules	2929 19 3000	Other

HSコード (統計品目番号) は、国際貿易商品の分類を世界的に統一した6桁の品目番号で、関税・統計等に関して世界の主要国で使用されています。また、7桁以降に各国や地域ごとに枝番が定められています。



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

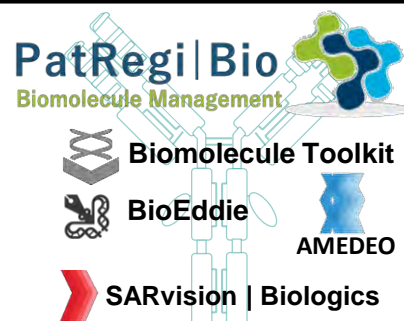
COMPLIANCE

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

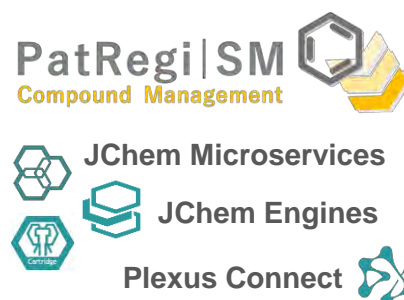
- ADCや化学修飾された核酸・ペプチドなど複雑なバイオ分子を正確に表現
- 長期間の相互運用性、組織外とのデータの互換性を維持
- 最先端の配列-活性相関解析・機械学習で創薬サイクルを改善



化学情報プラットフォーム

急速に増大する化合物データを最新のITで軽快に利活用

- バイオ分子登録系とも連携できる、フレキシブルな化合物登録システム
- サーバーレス、Docker技術を用いたスケーラブルなケムインフォ基盤
- 化学を熟知したITサービス



最も重要な資産である 研究データを活用しませんか？

dotmatics

● ● ● knowledge solutions

スポンサーセッション

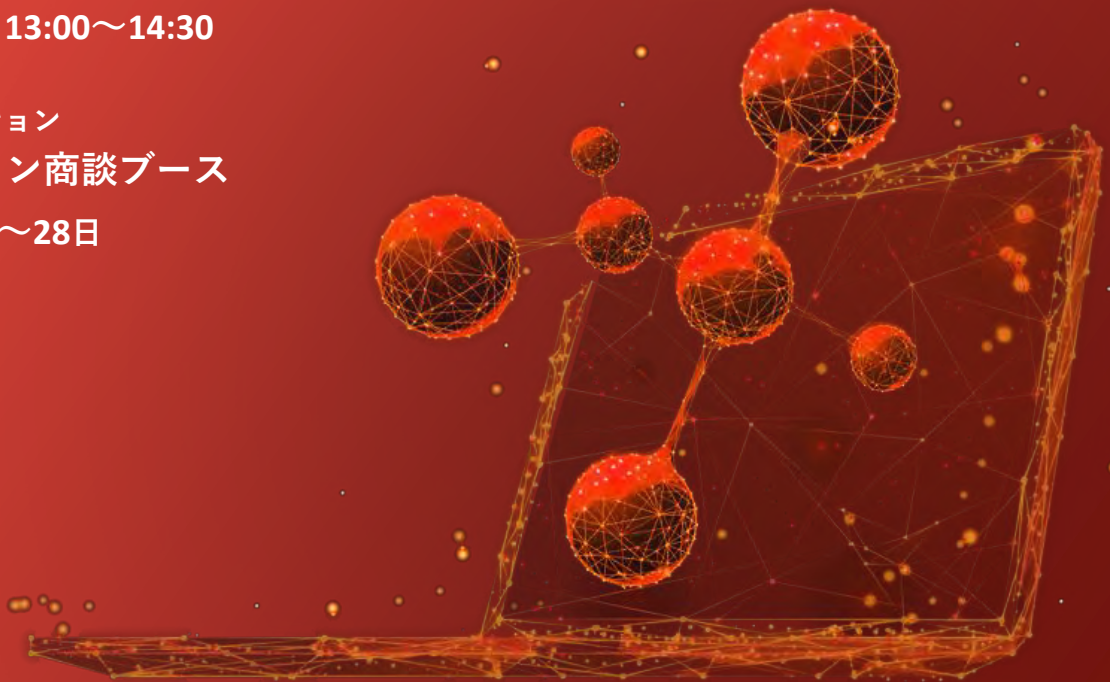
ドットマティクスが提供するAI/MLプロトタイプと
Cerevel Therapeutics 社の事例

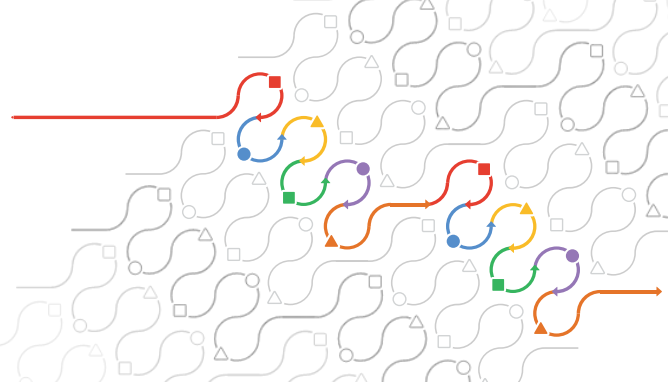
10月26日 13:00～14:30

企業セッション

オンライン商談ブース

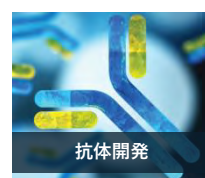
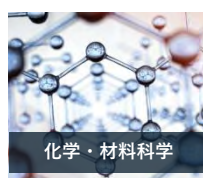
10月26日～28日





ドットマティクスについて

ドットマティクスは、製薬、化学・材料科学業界など、さまざまな業界における研究開発用のソフトウェアを提供しています。科学情報検索、電子実験ノート、化学・生物由来物質登録、可視化・解析などのアプリケーションを組み合わせ、お客様の研究に合った最適なソリューションをご提案いたします。クラウドで利用できるドットマティクスのプラットフォームは、安全で拡張性が高く、他社製品と比べてメンテナンスやアップグレードが簡単です。生物学的製剤の開発から化学・材料科学のイノベーションまで、幅広い分野の研究に対応いたします。



オンライン商談ブースのご案内

ドットマティクスのオンライン商談ブースでは、弊社のスタッフがお客様の状況をお伺いし、詳しいご説明やご提案をさせていただきます。会期中はスポンサーセッションの講演中（10月26日13:00～14:30）を除く、12:00～17:00の間でお待ちしています。どうぞお気軽にお越しください。



ドットマティクスが提供するAI/MLプロトタイプと *Cerevel Therapeutics* 社の事例

10月26日（火）スポンサーセッションで公開

ドットマティクス株式会社

【TEL】03-4577-1480 【FAX】03-4577-1481

【お問い合わせ】info@dotmatics.com

【WEBサイト】<https://www.dotmatics.com/ja>