



卓亚科技
DRYAS

BIOVIA Discovery Studio®

药物发现与生物大分子 模拟仿真计算平台

Discovery Studio™ (简称DS), 基于Windows/Linux系统和个人电脑、面向生命科学领域的新一代分子建模和模拟环境。它服务于生命科学领域的实验生物学家、药物化学家、结构生物学家、计算生物学家和计算化学家, 应用于蛋白质结构功能研究, 以及药物发现。为科学家提供易用的蛋白质模拟、优化和药物设计工具。通过高质量的图形、多年验证的技术以及集成的环境, DS将实验数据的保存、管理与专业水准的建模、模拟工具集成在一起, 为研究队伍的合作与信息共享提供平台。

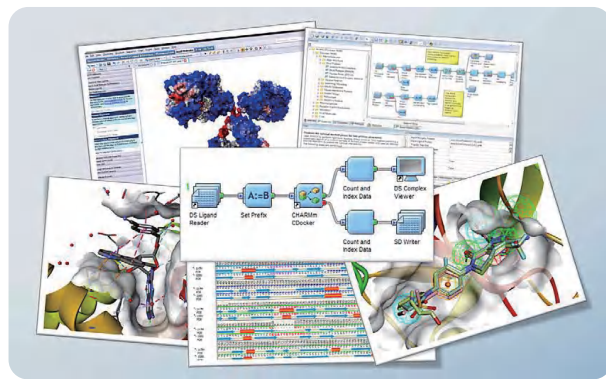
主要特点

✓ 全面的生命科学模拟综合平台

DS软件目前所涵盖的功能方法可以为药物的早期发现、临床前期和生物制药的开发提供相应的解决方案。

✓ 成熟可靠的研究方法

DS软件所涵盖的CHARMm、MODELER、Zdock、Delphi、Catalyst、Dmol3、VAMP、opKat、AggMap和Developability Index, 经过了近30年发展和验证, 并有大量科学家利用DS软件的研究成果, 发表于Cell、《Nature Science》等国际顶尖刊物中。



✓ 协同作业

DS Visualizer为DS软件提供一个用户友好界面的可视化界面, 使用户可以对感兴趣的系统模型进行快速的构建。

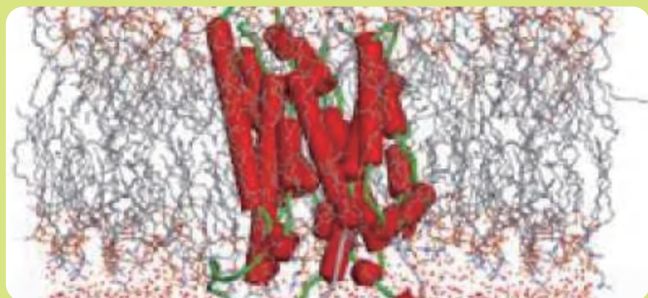
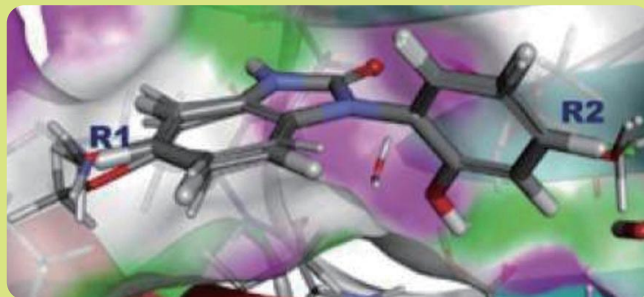
✓ DS软件是基于BIOVIA Pipeline Pilot开发的应用程序

- ◇ 每个DS软件任务都对应一个Pipeline Pilot协议, 可确保真正开放的建模和仿真环境;
- ◇ 可以与第三方应用程进行集成, 包括CCDC GOLD软件和伊利诺伊大学香槟分校NAMD (用户需要自行准备这两款软件);
- ◇ DS软件包含以下Pipeline Pilot组件许可: Core、Integration、Reporting、Chemistry、Sequence Analysis、ADMET。

功能特点

1. 分子模拟：

- ◇ 分子力学：基于广泛认可的BIOVIA CHARMM®分子力场，处理各种小分子、大分子（包括蛋白质、核酸和糖）的经验化能量计算，包括：相互作用能及构象能量、局域最小化、旋转势垒、与时间相关的动力学行为、振动频率等。模拟过程提供了有关分子结构、相互作用、能量等信息。
- ◇ 量子力学：基于DFT的DMol3、半经量子力学-VAMP、量子力学与分子力学QM/MM杂化方法（DMol3/CHARMM）

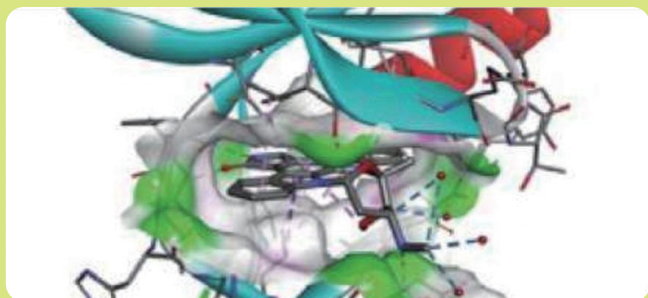
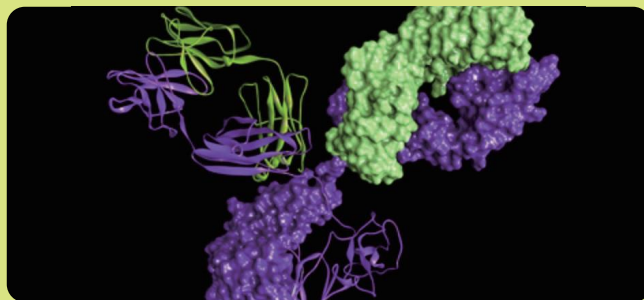


2. 大分子设计与分析

- ◇ 基于广泛认可的MODELER同源性建模算法
- ◇ 基于pH值的最佳蛋白质电离工具
- ◇ 基于pH的蛋白质稳定性、结合亲、突变的研究分析
- ◇ 可靠的蛋白质-蛋白质结合预测ZDOCK算法

3. 抗体开发

- ◇ 首个且最完整的结构预测和仿真工具集,专门用于抗体研究
- ◇ 经过验证的自动化结构预测工作流程, 以提供最佳的抗体同源性模型
- ◇ 独特专利的AggMap蛋白聚合及可Developability Index
- ◇ 快速识别生物治疗学中中与翻译后修饰 (PTM) 位点相关的序列基序



4. 基于结构的设计（SBD）

- ◇ 基于物理的（CHARMM、CDOCKER）对接引擎
- ◇ 独特的非结合分析监测方法，包括有利、不利和不满意的交互类型
- ◇ 基于MMP方法SAR分析

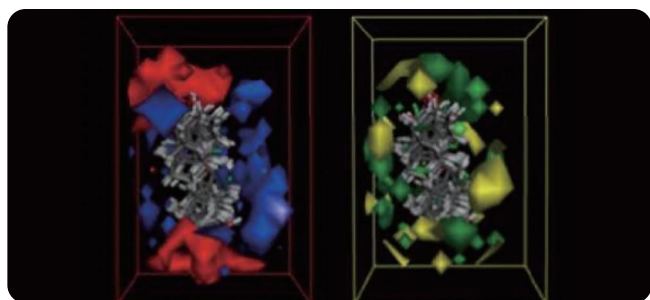
5. 基于片段的设计（FBD）

- ◇ 使用来自BIOVIA的ca.10k预过滤试剂，使用经典的药物化学反应来原位计数
- ◇ 使用来自BIOVIA SCD的约1.5M市售化合物原位进行支架跳跃
- ◇ 新型Karplus MCSS基于片段的小分子设计工具



6. 基于药效团和配体的设计

- ◇ 采用经典的CATALYST药效团算法引
- ◇ 包括独特的受体-配体药效团创建
- ◇ 最全面、最准确的基于受体-配体晶体结构复合的产生的药效团数据库, PharmaDB
- ◇ 使用CNX, 生成电子密度图, 进行全面优化并使用HT-XPIPE进行蛋白质-配体复合物的自动结构测定



7. QSAR、ADMET和TOPKAT预测毒理学

- ◇ QSAR: 计算物理化学, 拓扑指纹特性并创建PLS, GFA, MLR等
- ◇ 最广泛的ADMET和预测毒理学模型集, 包括BBB渗透, 肝毒性, CYP2D6, AMES, Rat Oral LD50等

8. X-射线

- ◇ 使用CNX, 生成电子密度图, 进行全面优化并使用HT-XPIPE进行蛋白质-配体复合物的自动结构测定

产品效益



降低研发成本

实施昂贵的实验之前, 通过计算模拟预测各种假设, 减少将产品推向市场所需的时间和费用。



提高研发效率

利用值得信赖的生命科学建模和模拟工具, 推动从目标识别到线索优化的科学探索。



降低项目风险

利用BIOVIA Pipeline Pilot实现流程自动化, 创建和部署自定义 workflow, 并整合数据类型、数据库和第三方或内部工具。

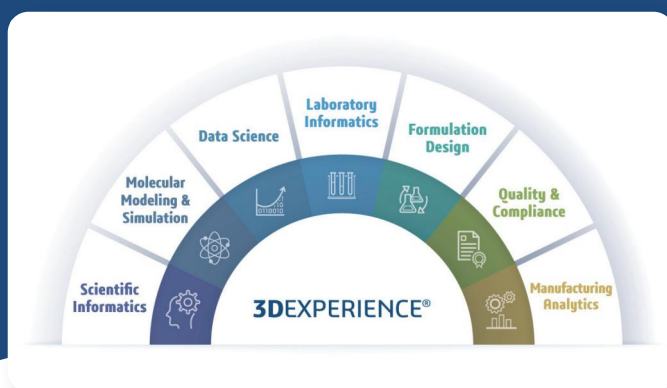


提高团队协作

通过共享数据让研究人员做出更明智的决定, 提高个人生产力并促进团队合作。

关于达索系统

作为一家为全球客户提供3DEXPERIENCE解决方案的行业领导者，达索系统致力于成为人类发展进程的催化剂，为客户提供可协同的3D虚拟空间来推动可持续创新。利用达索系统的3DEXPERIENCE平台和行业解决方案，我们的客户对真实世界进行数字孪生，从而突破创新、学习和生产的界限。达索系统为140多个国家超过27万个不同行业、不同规模的客户带来价值。



关于 BIOVIA

BIOVIA是达索系统(Dassault Systems)的子品牌，其整合了达索系统在生物制药、生命科学、化工、材料科学等领域的应用,是目前全球范围内唯一能够提供分子模拟、化学信息学和生物信息学全面软件解决方案及相关服务的最大供应商。



关于卓亚科技

北京卓亚医药科技有限公司（以下简称“卓亚科技”）致力于为生命科学行业提供最佳信息化及数据科学解决方案。

自2015年成立以来，卓亚科技已成功为中国大陆及香港、台湾地区超过100家客户提供信息化建设服务，其中包括行业内知名的生物制药企业、CRO企业，研发中心、高校、医院临床试验机构等。

卓亚科技分别在北京与上海设有办公室，已在全国范围内建立了成熟稳定的销售及务网络。公司核心团队均在生命科学行业信息化建设及合规咨询、数据科学、分子建模与仿真方面拥有超过10年以上的丰富经验。卓亚科技技术团队具备专业的项目管理与质量管理能力，并获得ISO9001质量管理体系认证。卓亚科技能够为客户提供生命科学行业从早期研发到生产制造的端到端解决方案，包含信息化产品实施、电子数据备份及IT基础架构建设、计算机化系统验证等服务，以及一流的分子模拟与仿真软件的销售与技术支持。

作为生命科学行业信息化建设与咨询服务的领导者，卓亚科技与世界一流的信息化产品供应商携手合作。在专业、诚信、合规、高效的价值观引领下，卓亚科技将坚持不渝的为生命科学行业客户提供完善且高质量的服务。





北京卓亚医药科技有限公司

Beijing Dryas Pharma-Tech Co.,Ltd

北京办公室

北京|海淀区西四环北路158号1幢七层7-106

上海办公室

上海|浦东新区张江盛荣路88弄盛大源创谷1号楼208室

电话/TEL

010-53656003 (北京)

021-50460325 (上海)

网址/WEB

www.dryas.com.cn