

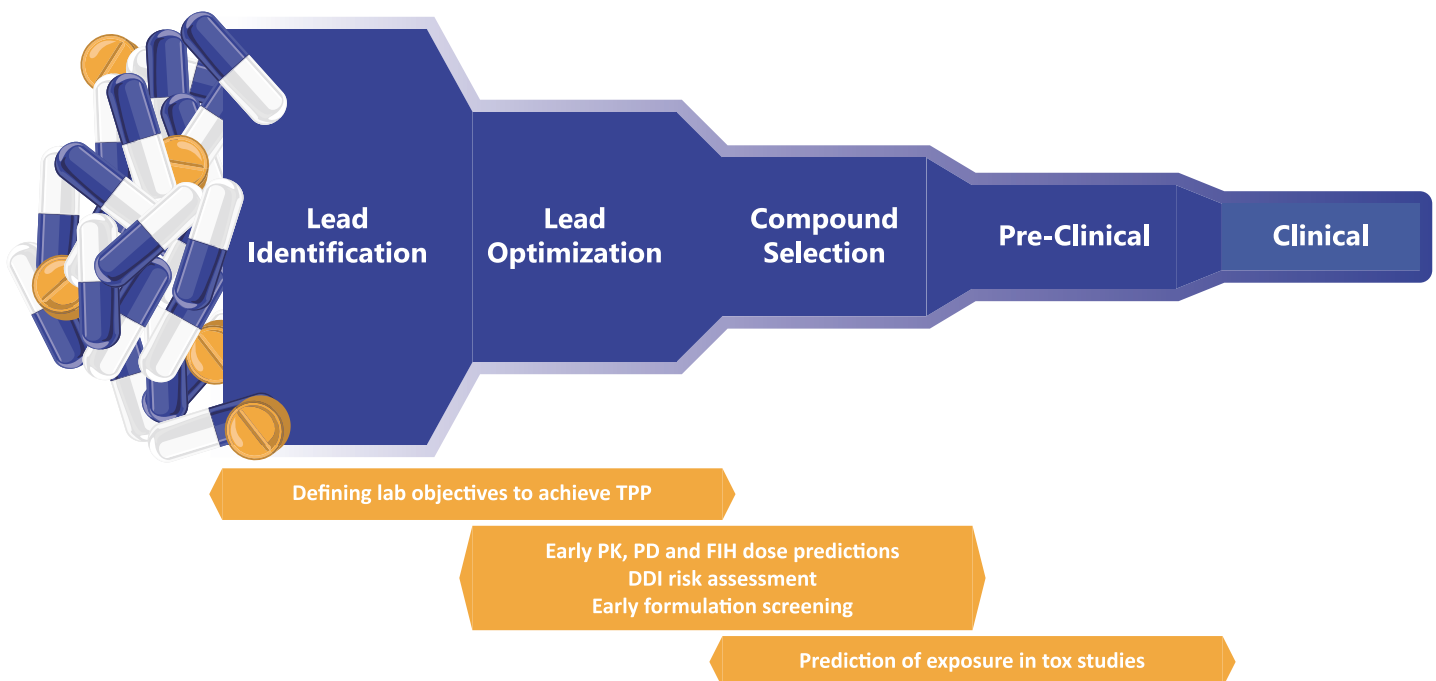
Simcyp™ Discovery 模拟器

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

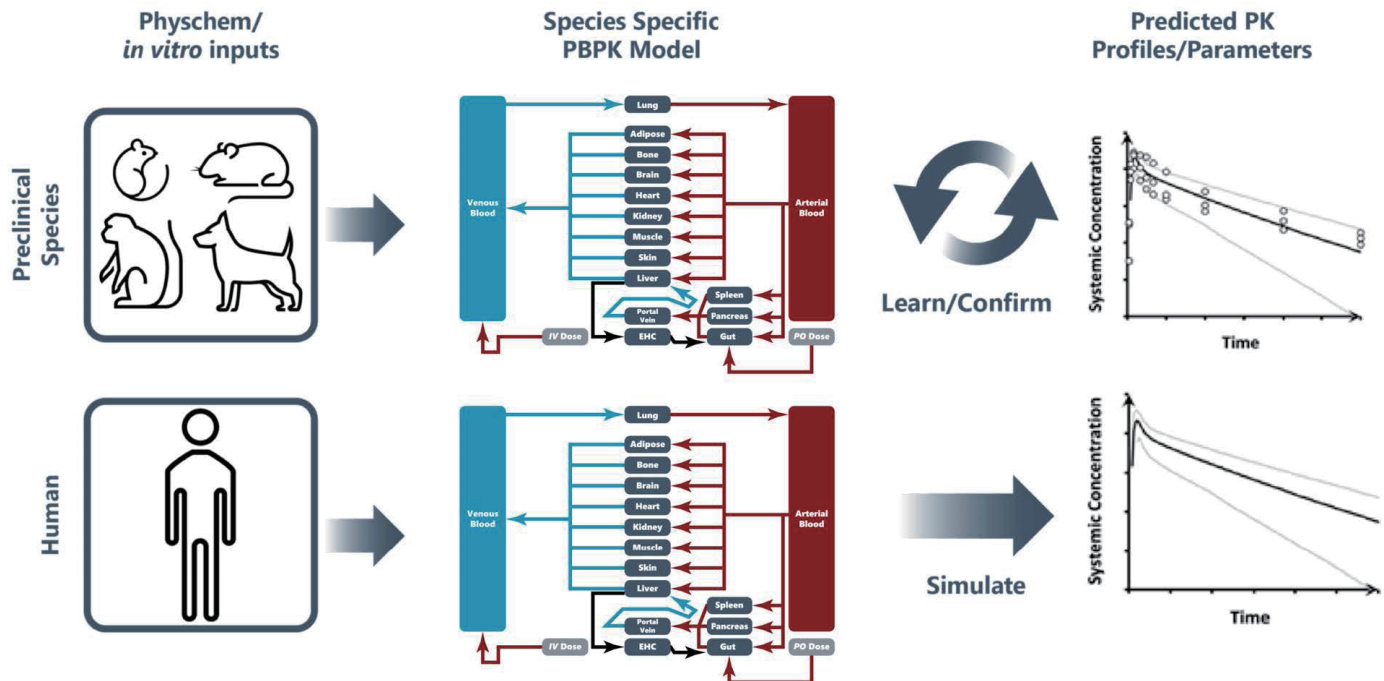
Simcyp Discovery 在药物开发早期阶段具有广泛的应用及诸多优势，其中包括 4 项主要用例。

首次人体试验 (FIH) 剂量预测

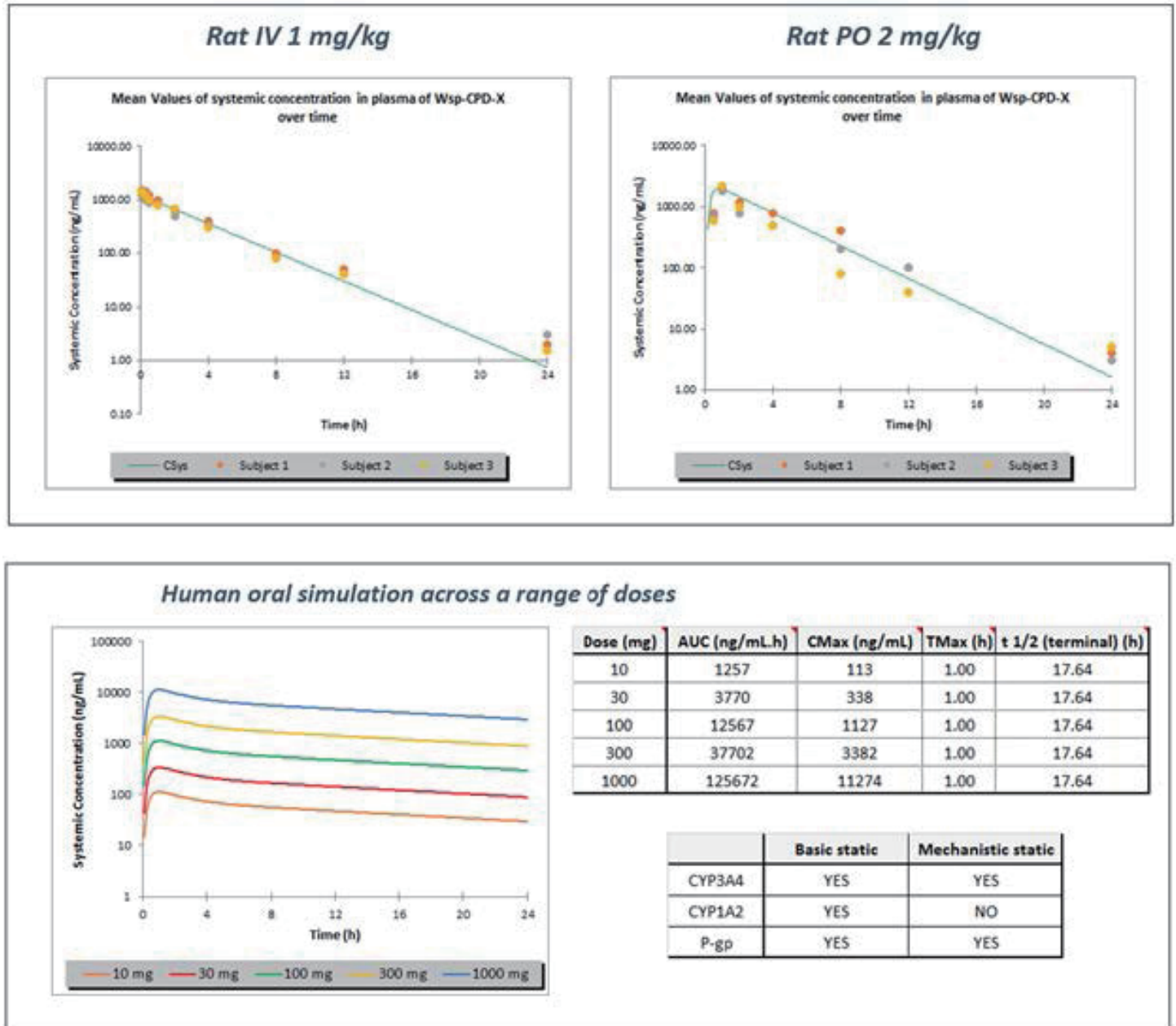
拟定的 FIH 剂量以及支持 FIH 剂量选择的有力理论依据是 IND 申请的重要组成部分。与 PBPK 模型相关的体外 - 体内外推法 (IVIVE) 可用于数据有限的早期阶段的 PK 与剂量预测。这能帮助我们机制性地理解生理变量所带来的影响。

- 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

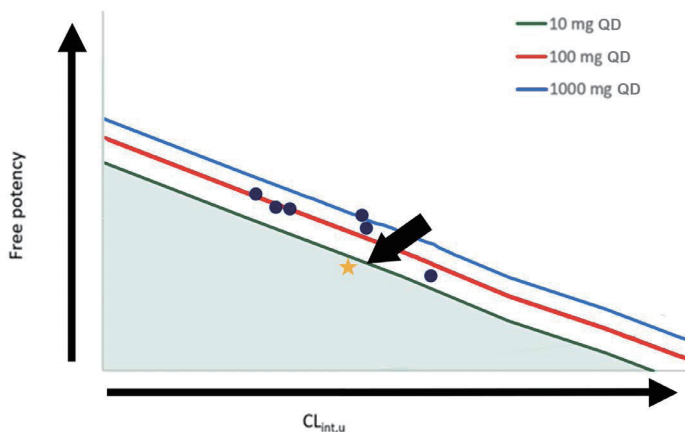
早期 DDI 筛查

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



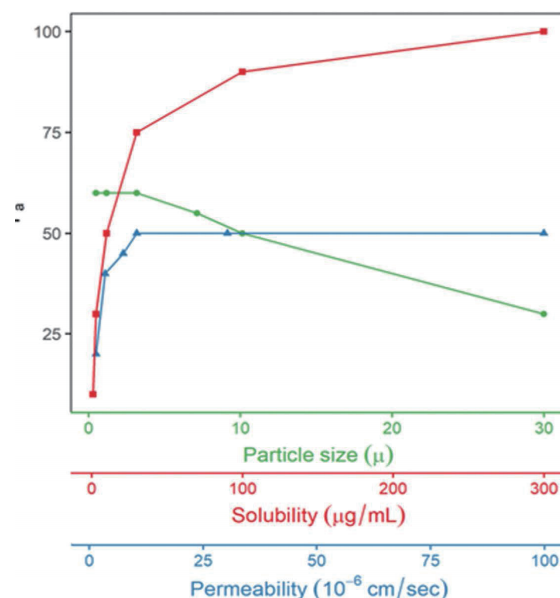
仅供举例说明使用

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

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/>

关于创腾科技

创腾科技专注医药和材料科学研究领域 21 年，通过对云计算，移动互联网和科学人工智能的技术的创新应用，帮助企业 and 创新科研机构快速进行研发的数字化转型，实现智能创新。

创腾科技拥有业界领先的从数字化研发到智能创新的整体移动互联解决方案，包括 iLabPower 数字化研发平台（涵盖研发与质量检测），SDH 科学数据基因组平台和 MaXFlow 科学人工智能创新平台。

创腾科技拥有超过千家用户，正在服务数万名中国的科技精英，国内顶级的科研机构，名列前茅的制药企业，CRO/CDMO 和石油化工企业，以及新药创新的明星企业都在利用创腾科技的数字化研发及智能创新平台，实现其智能创新的核心战略。

联系电话：尤先生 18248883406

梁女士 13701322128

创腾官网：www.neotrident.com

创腾邮箱：market@neotrident.com



敬请关注微信公号