

An Introduction

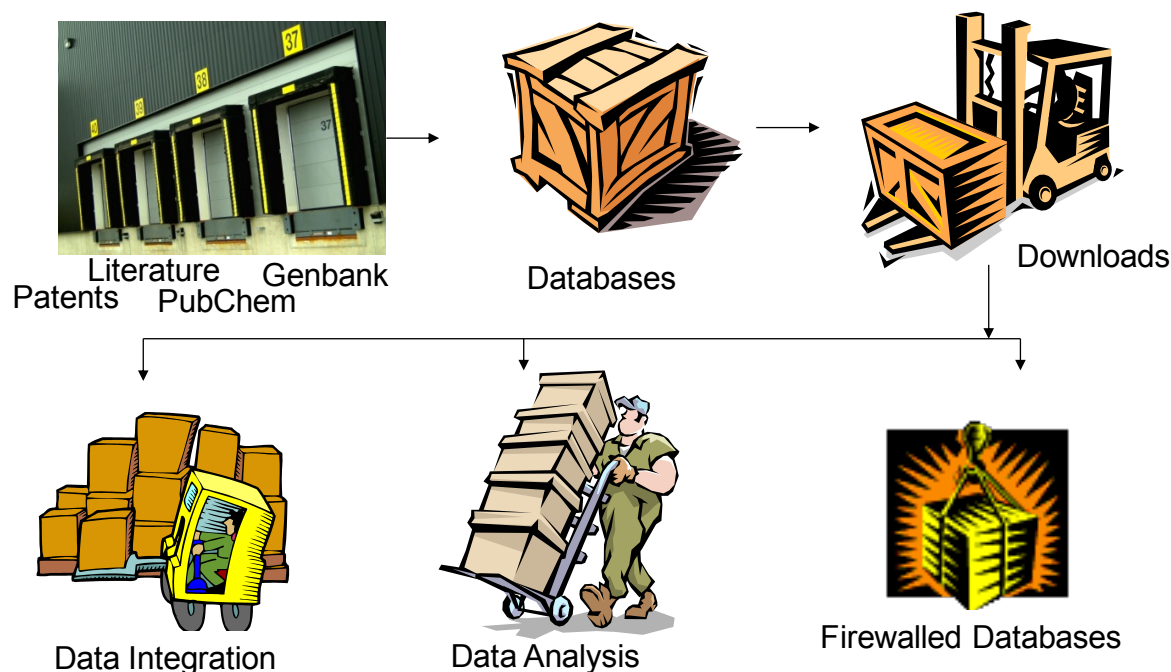
Anna Gaulton

European Molecular Biology Laboratory – European Bioinformatics Institute



Background - pre-competitive Informatics:

Pharma are all accessing, processing, storing & re-processing external research data



Lowering industry firewalls: pre-competitive informatics in drug discovery
Nature Reviews Drug Discovery (2009) 8, 701-708 doi:10.1038/nrd2944



The Innovative Medicines Initiative

- EC funded public-private partnership for pharmaceutical research
- Focus on key problems
 - Efficacy, Safety, Education & Training, **Knowledge Management**



The Open PHACTS Project

- Create a *semantic integration hub* (“Open Pharmacological Space”)...
- Delivering services to support drug discovery programs in pharma and public domain
- Leading academics in semantics, pharmacology and informatics
- Driven by solid industry business requirements
- 23 academic partners, 8 pharmaceutical companies, 3 biotechs

The Project



Pathways

Proteins

Interactions

Pharmacological
Activities

Genes

Transcripts

Drug Discovery Information

Clinical Drug
Applications

Biological
Processes

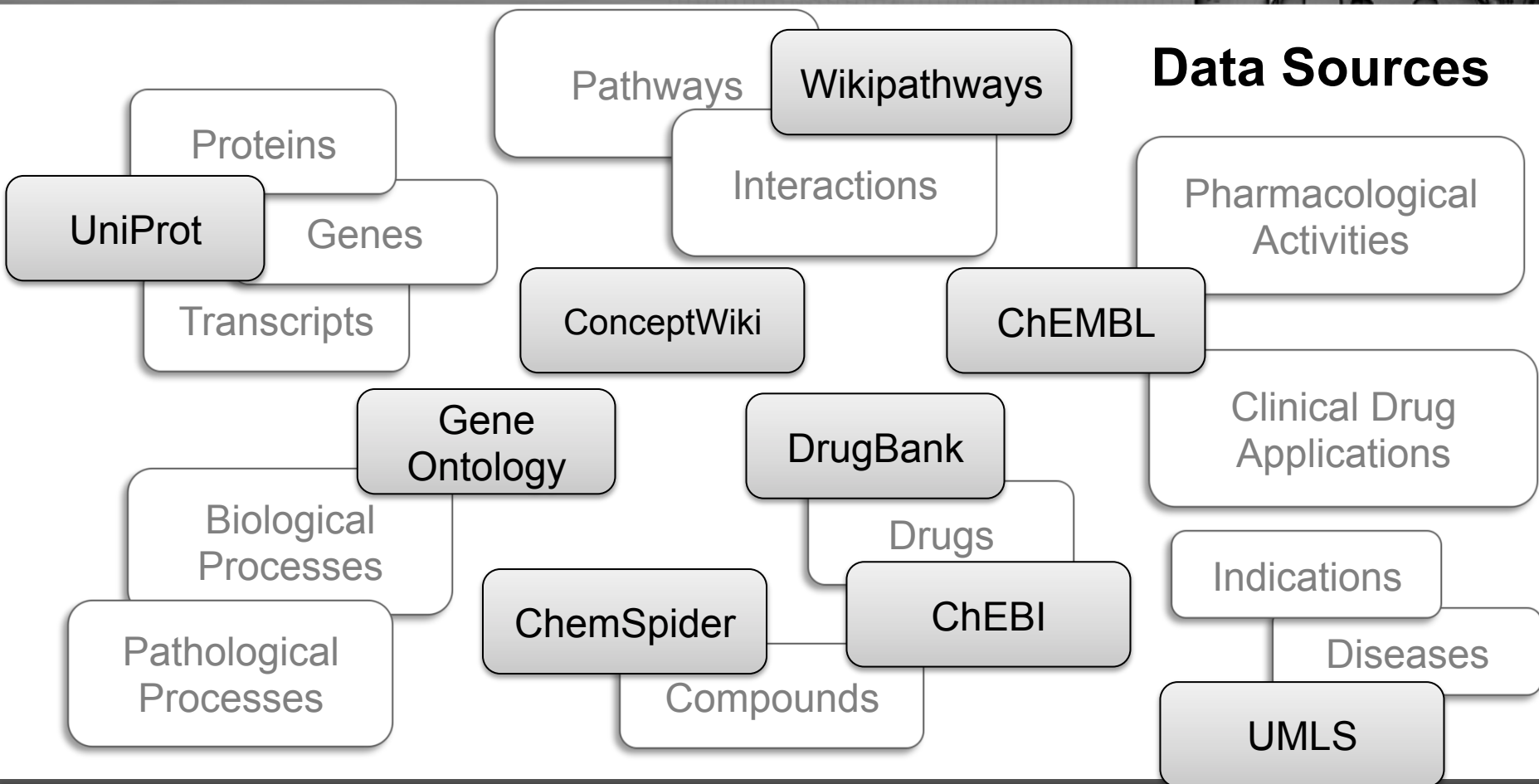
Drugs

Indications

Pathological
Processes

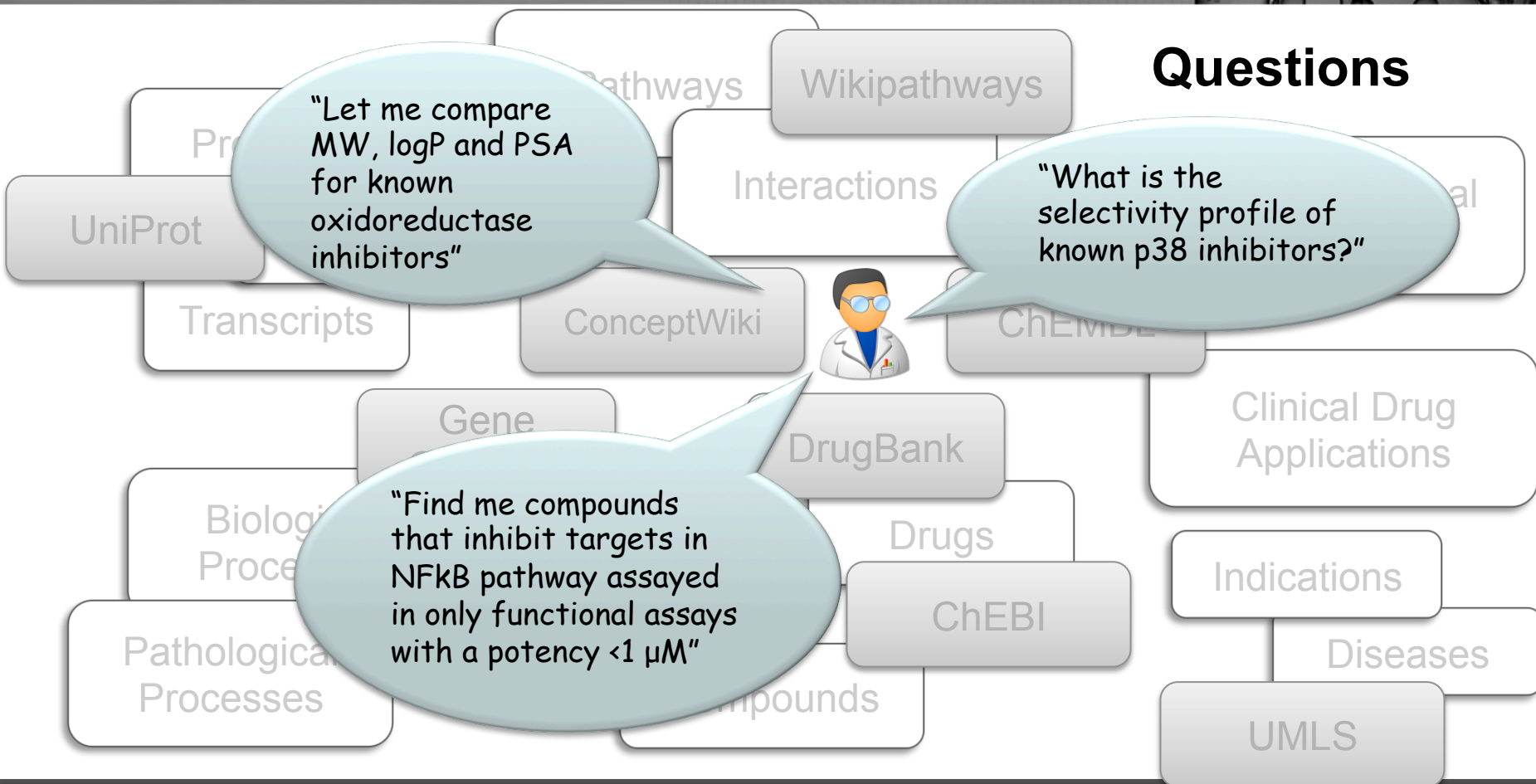
Compounds

Diseases





Questions





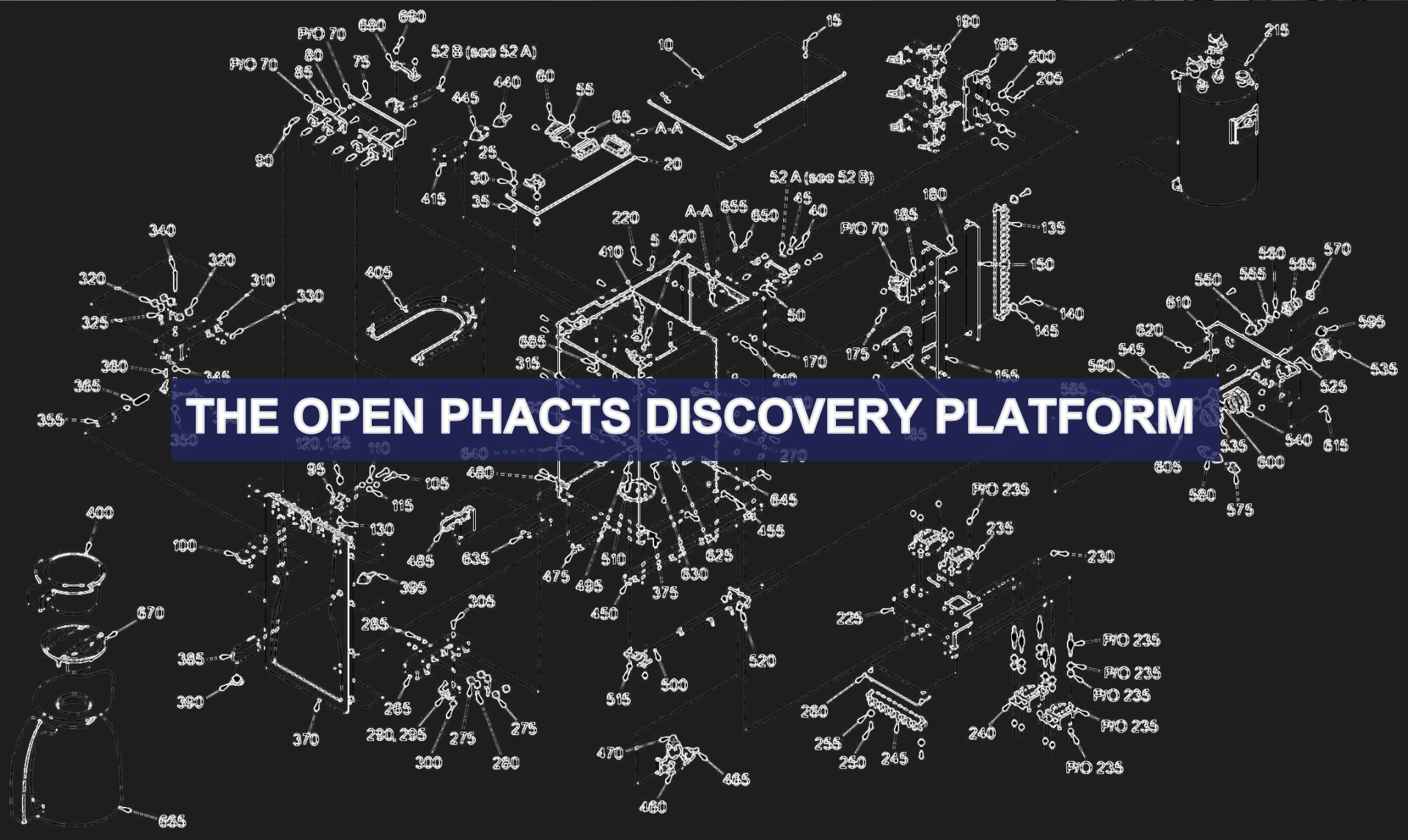
Business Question Driven Approach

Number	sum	Nr of 1	Question
15	12	9	All oxidoreductase inhibitors active <100nM in both human and mouse
18	14	8	Given compound X, what is its predicted secondary pharmacology? What are the on and off, target safety concerns for a compound? What is the evidence and how reliable is that evidence (journal impact factor, KOL) for findings associated with a compound?
24	13	8	Given a target find me all actives against that target. Find/predict polypharmacology of actives. Determine ADMET profile of actives.
32	13	8	For a given interaction profile, give me compounds similar to it.
37	13	8	The current Factor Xa lead series is characterised by substructure X. Retrieve all bioactivity data in serine protease assays for molecules that contain substructure X.
38	13	8	Retrieve all experimental and clinical data for a given list of compounds defined by their chemical structure (with options to match stereochemistry or not).
41	13	8	A project is considering Protein Kinase C Alpha (PRKCA) as a target. What are all the compounds known to modulate the target directly? What are the compounds that may modulate the target directly? i.e. return all cmpds active in assays where the resolution is at least at the level of the target family (i.e. PKC) both from structured assay databases and the literature.
44	13	8	Give me all active compounds on a given target with the relevant assay data
46	13	8	Give me the compound(s) which hit most specifically the multiple targets in a given pathway (disease)
59	14	8	Identify all known protein-protein interaction inhibitors

... paper coming very soon in DDT



THE OPEN PHACTS DISCOVERY PLATFORM





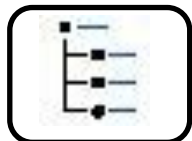
Semantic web technologies

Resource Description Framework - standard for representation of semantic web data as triples:

	Subject	Predicate	Object
e.g.,	Gleevec	hasBiologicalRole	Tyrosine kinase inhibitor

Ontologies – formal representation of concepts:

e.g.,
CHEBI:24432 'biological role'
CHEBI:38637 'tyrosine kinase inhibitor'
CHEBI:38637 is a CHEBI:37699 'protein kinase inhibitor'





Chemistry Registration

- ChemSpider Validation and Standardization Platform (CVSP) developed:
 - Validation of structures to be registered
 - Identification of incorrectly specified stereochemistry
 - Incorrect valence on atoms
 - Unrecognised atom types etc
 - Rule set developed for standardisation of structures
 - FDA rule set as basis (GSK lead)
 - Also incorporates InChI rules
 - Validated and standardised structures are assigned an Open PHACTS identifier (OPS ID)



Quantitative Data Challenges

STANDARD_TYPE	UNIT_COUNT
AC50	7
Activity	421
EC50	39
IC50	46
ID50	42
Ki	23
Log IC50	4
Log Ki	7
Potency	11
log IC50	0

STANDARD_TYPE	STANDARD_UNITS	COUNT (*)
IC50	nM	829448
IC50	ug.mL-1	41000
IC50		38521
IC50	ug/ml	2038
IC50	ug ml-1	509
IC50	mg kg-1	295
IC50	molar ratio	178
IC50	ug	117
IC50	%	113
IC50	uM well-1	52

>5000 types

~ 100 units

Implemented using the Quantities, Dimension, Units, Types
Ontology (<http://www.qudt.org/>)



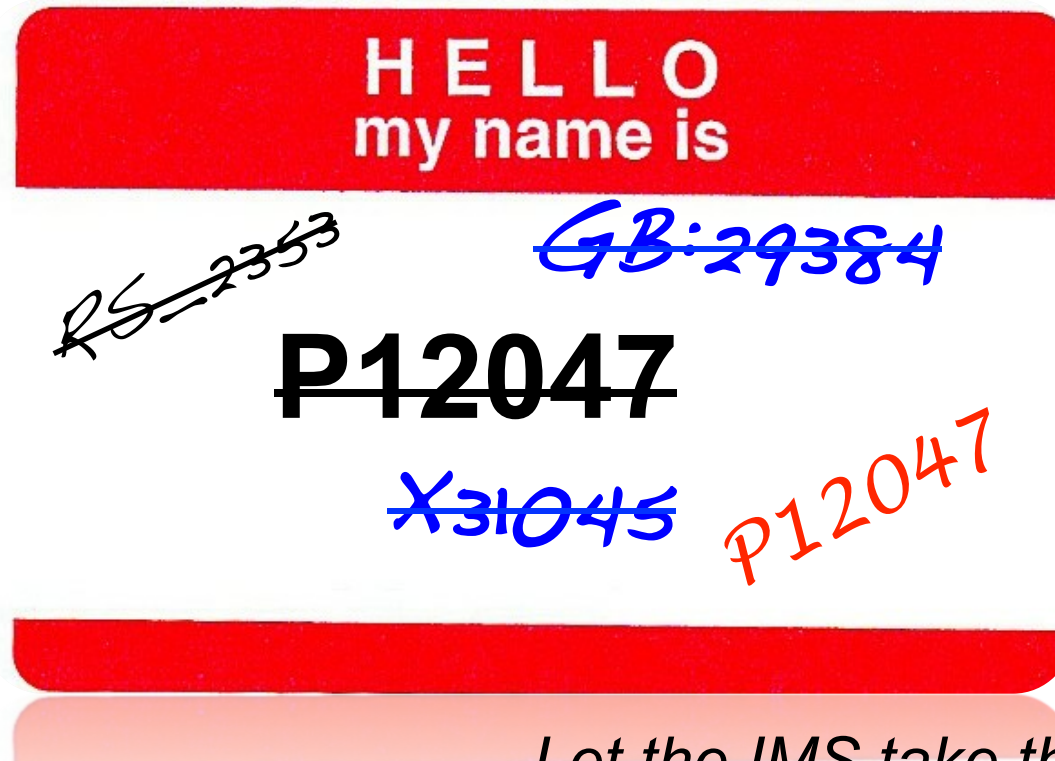
Cache - Current Content

<u>Source</u>	<u>Initial Records</u>	<u>Triples</u>	<u>Properties</u>
ChEMBL	1,091,462 cpds 8845 targets	146,079,194	17 cpds 13 targets
DrugBank	14,000 drugs 5000 targets	517,584	74
UniProt	536,789	156,569,764	78
ENZYME	6,187	73,838	2
ChEBI	35,584	905,189	2
GO/GOA	38,137	24,574,774	42
ChemSpider/ACD	1,194,437	161,336,857	22 ACD, 4 CS
ConceptWiki	2,828,966	3,739,884	1
WikiPathways	NEW		
AERS	NEW		



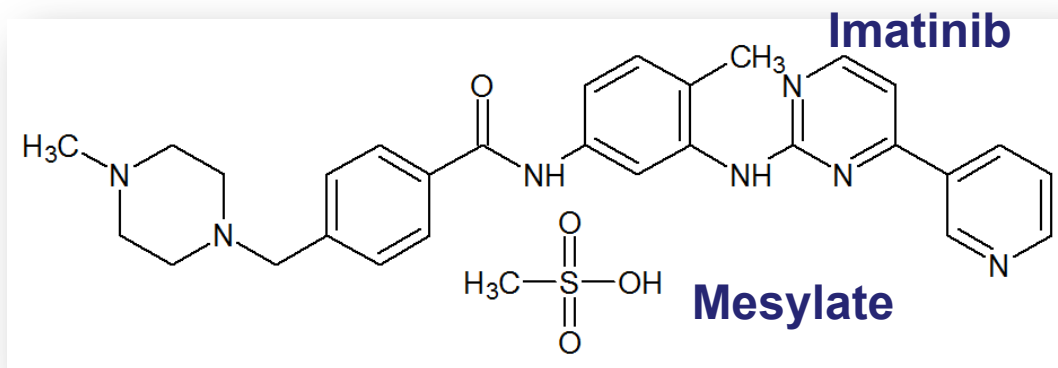
Andy Law's Third Law

“The number of unique identifiers assigned to an individual is never less than the number of Institutions involved in the study”... and is frequently many, many more.





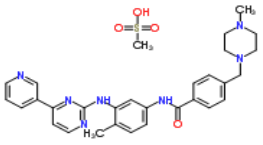
What Is Gleevec?



ChemSpider
The free chemical database

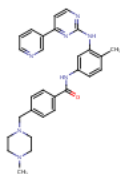
About | More Searches | Web APIs

Gleevec



ChemSpider ID: 123596
Molecular Formula: C₂₉H₃₁N₇O₄S
Average mass: 493.602740 g/mol
Monoisotopic mass: 493.602740 g/mol
Systematic name: 4-[[4-(4-methyl-1-piperazinyl)methyl]phenyl]pyridine-2-carboxamide mesylate

ChemSpider

Structure	 Download: MOL SDF SMILES InChI Display: 2D Structure 3D Structure
Synonyms	<ul style="list-style-type: none"> Imatinib Mesylate Imatinib Methansulfonate STI-571
Brand names	<ul style="list-style-type: none"> Gleevec Glivec

Drugbank

Imatinib; 152459-95-5; sti-571 ...
MW: 493.602740 g/mol MF: C₂₉H₃₁N₇O
IUPAC name: 4-[[4-(4-methylpiperazin-1-yl)methyl]phenyl]pyridine-2-carboxamide
Active in 205 BioAssays Tested in 1376 BioAssays
CID: 5291
[Similar Compounds](#) [Same Parent, Connectivity](#)
[\(MeSH Keyword\)](#)

Imatinib mesylate; Gleevec; Glivec ...
MW: 589.708400 g/mol MF: C₃₀H₃₅N₇O₄S
IUPAC name: methanesulfonic acid; 4-[[4-(4-methylpiperazin-1-yl)methyl]phenyl]pyridine-2-carboxamide
Active in 35 BioAssays Tested in 679 BioAssays
CID: 123596
[Similar Compounds](#) [Same Parent, Connectivity](#)
[\(MeSH Keyword\)](#)

PubChem



Dynamic Equality

Strict

Relaxed



Analysing

Browsing

chemspider:gleevec

drugbank:gleevec

```
LinkSet#1 {  
  chemspider:gleevec hasParent imatinib ...  
  drugbank:gleevec exactMatch imatinib ...  
}
```


Advanced analytics

ChemBioNavigator	Navigating at the interface of chemical and biological data with sorting and plotting options
TargetDossier	Interconnecting Open PHACTS with multiple target centric services. Exploring target similarity using diverse criteria
PharmaTrek	Interactive Polypharmacology space of experimental annotations
UTOPIA	Semantic enrichment of scientific PDFs

Predictions

GARFIELD	Prediction of target pharmacology based on the Similar Ensemble Approach
eTOX connector	Automatic extraction of data for building predictive toxicology models in eTOX project




Open PHACTS Explorer

Navigation

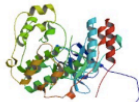
- Compound
- Target
- Pharmacology

Target by name

Hint: Start typing in protein name and species. E.g. "Adenosine receptor A2a (Homo sapiens)"

Target name: Provenance: ☐ On ☒ Off

Target Data

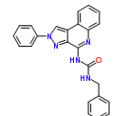
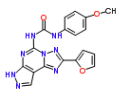
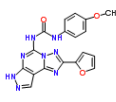
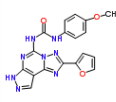
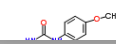


Mitogen-activated protein kinase 14 (Homo sapiens)

Protein name:



Filter Provenance: ☐ On ☒ Off

Pharmacology by Target name search results - Total Records: 7887

	Structure	Compound Name	Target Name	Target Organism	Assay Organism	Assay Description	Activity Type	Relation	Value	Units	Mol Weight	SMILES	InChI
1		urea, N-(phenylmethyl)-N'-(2-phenyl-2H-pyrazolo[3,4-c]quinolin-4-yl)-	Adenosine receptor A3 (Homo sapiens)	Homo sapiens		Displacement of specific [¹²⁵ I]AB-MECA binding at human adenosine A3 receptor expressed in CHO cells	Ki	=	8.3	nM	393.441	O=C(NC1Cccccc1)NC2=CN3C=CC=CC=C3N=C2C1	InChI=1S/C...
2		1-[2-(furan-2-yl)-7H-pyrazolo[4,3-e][1,2,4]triazolo[1,5-c]pyrimidin-5-yl]-3-(4-methoxyphenyl)urea	Adenosine receptor A3 (Homo sapiens)	Homo sapiens	Homo sapiens	Displacement of [³ H]MRE3008-F20 from human adenosine A3 receptor expressed in CHO cells; range 0.08-0.27	Ki	=	0.14	nM	390.356	COc1ccc(cc1)N...	InChI=1S/C...
3		1-[2-(furan-2-yl)-7H-pyrazolo[4,3-e][1,2,4]triazolo[1,5-c]pyrimidin-5-yl]-3-(4-methoxyphenyl)urea	Adenosine receptor A3 (Homo sapiens)	Homo sapiens	Homo sapiens	Percent reversal of 100 nM IB-MECA-inhibited cAMP accumulation in CHO cells expressing human A3 adenosine receptor at 1 uM	Inhibition	=	98	%	390.356	COc1ccc(cc1)N...	InChI=1S/C...
4		1-[2-(furan-2-yl)-7H-pyrazolo[4,3-e][1,2,4]triazolo[1,5-c]pyrimidin-5-yl]-3-(4-methoxyphenyl)urea	Adenosine receptor A3 (Homo sapiens)	Homo sapiens	Homo sapiens	Inhibition of cAMP accumulation in CHO cells expressing human A3 adenosine receptor	IC50	=	1.8	nM	390.356	COc1ccc(cc1)N...	InChI=1S/C...
5		1-[2-(furan-2-yl)-7H-pyrazolo[4,3-e][1,2,4]triazolo[1,5-c]pyrimidin-5-yl]-3-(4-methoxyphenyl)urea	Adenosine receptor A3 (Homo sapiens)	Homo sapiens	Homo sapiens	Inhibition of cAMP accumulation in CHO cells expressing human A3 adenosine receptor	IC50	=	1.8	nM	390.356	COc1ccc(cc1)N...	InChI=1S/C...






PharmaTrek




TARGETS




p38 alpha homo X You have 1 targets selected

Mitogen-activated protein kinase 14 (Homo sapiens)
Amino Acid, Peptide, or Protein


  

alpha thalassemia/mental retardation syndrome X-linked homolog (human) protein, mouse
Amino Acid, Peptide, or Protein




  


   ☐ connect

LIGANDS







2(1H)-quinazolinone, 5-(2-chloro-4-fluorophenyl)-1-(2,6-dichlorophenyl)-3,4-dihydro-7-(4-piperidinyl)-






2(1H)-quinazolinone, 5-(2-chloro-4-fluorophenyl)-1-(2,6-dichlorophenyl)-3,4-dihydro-7-(4-piperidinyl)-

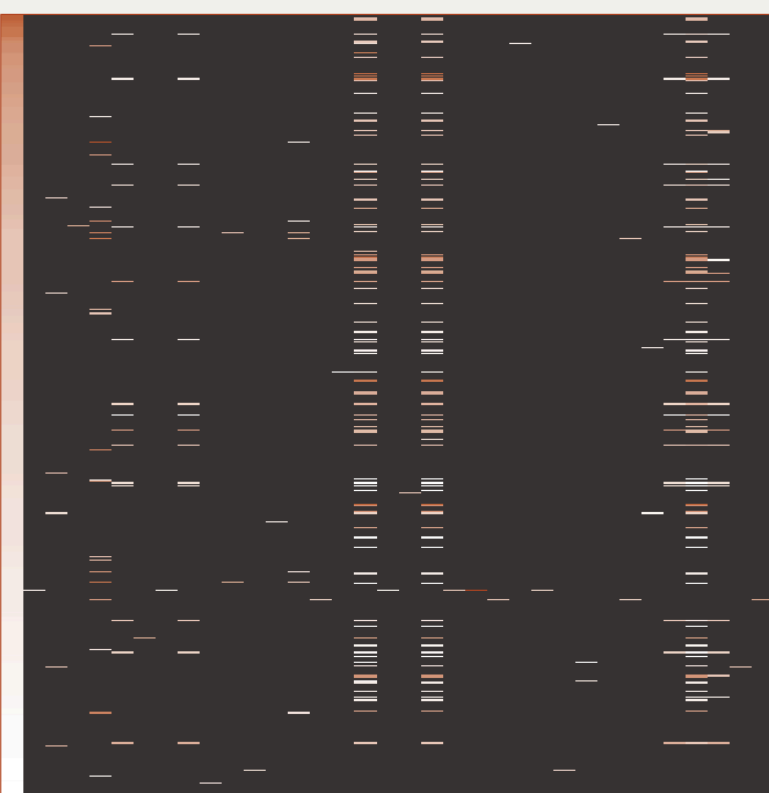
  



2(1H)-quinazolinone, 5-(2-chlorophenyl)-1-(2,6-dichlorophenyl)-3,4-dihydro-7-(1-piperazinylmethyl)-




  

Interaction Map



35 TARGETS
546 MOLECULES
Min annotation [8.00]
Max annotation [10.41]

☒ Expand target space



Utopia

Utopia Documents - pcbi.1000976 1..16

Back to overview

acetolactate

2-acetolactate mutase

2-acetolactate mutase
In enzymology, a 2-acetolactate mutase is an enzyme that catalyzes the chemical reaction 2-acetolactate \rightarrow 3-hydroxy-2-methyl-2-oxobutanoate. Hence, this enzyme has one substrate, 2-acetolactate, and one product, 3-hydroxy-2-methyl-2-oxobutanoate. This enzyme belongs to the family of isomerases, specifically those intramolecular transferases transferring other groups. The systematic name of this enzyme class is 2-acetolactate methylmutase.

[View Wikipedia web page...](#)

Acetolactate decarboxylase

Acetolactate decarboxylase
In enzymology, an acetolactate decarboxylase is an enzyme that catalyzes the chemical reaction (S)-2-hydroxy-2-methyl-3-oxobutanoate \rightarrow (R)-2-acetoin + CO₂. Hence, this enzyme has one substrate, (S)-2-hydroxy-2-methyl-3-oxobutanoate, and two products, (R)-2-acetoin and CO₂. This enzyme belongs to the family of lyases, specifically the carboxy-lyases, which cleave carbon-carbon bonds.

[View Wikipedia web page...](#)

ACETOLACTSYNI-CPLX

ACETOLACTSYNI-CPLX
Bifunctional aceto-hydroxybutanoate synthase / acetolactate synthase (IlvN) carries out both the first step in valine biosynthesis and the second step in isoleucine biosynthesis. The IlvN protein complex catalyzes the conversion of pyruvate and oxobutanoate into 2-aceto-2-hydroxy-butyrate and the conversion of pyruvate into 2-acetolactate. Both reactions generate carbon dioxide as a product [CITS: 14608700][370104][7099323][6181375][3011751][16326011]. This enzyme has a wide substrate range *in vitro* [CITS: 15558598]. This bifunctional enzyme is a tetramer comprising two IlvB subunits and two IlvN subunits. Its apparent molecular weight rises above the expected weight for this configuration when pyruvate is added *in vitro* [CITS: 6360995]. The IlvB large subunit can catalyze the reaction in isolation and is not inhibited by valine in the manner of the holoenzyme. However the Vmax for the reaction as catalyzed by only IlvB is

Look up

Table 4: The 12 most highly connected drugs in the network.

Drug	Intended Targets	Total Number of Connections	Connected <i>Mtb</i> proteins with Solved Structures
Albendazole	Retinoic acid receptor (RAR- α , β & γ), retinoic acid receptor α , β & γ -1A2, cellular retinoic acid-binding protein 1A2	98	<i>aroG</i> , <i>bioD</i> , <i>hspC</i> , <i>opp125</i> , <i>embR</i> , <i>glnH</i> , <i>inhA</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i> , <i>lpxN</i> , <i>lpxO</i> , <i>lpxP</i> , <i>lpxQ</i> , <i>lpxR</i> , <i>lpxS</i> , <i>lpxT</i> , <i>lpxU</i> , <i>lpxV</i> , <i>lpxW</i> , <i>lpxX</i> , <i>lpxY</i> , <i>lpxZ</i> , <i>lpxA</i> , <i>lpxB</i> , <i>lpxC</i> , <i>lpxD</i> , <i>lpxE</i> , <i>lpxF</i> , <i>lpxG</i> , <i>lpxH</i> , <i>lpxI</i> , <i>lpxJ</i> , <i>lpxK</i> , <i>lpxL</i> , <i>lpxM</i>



Workflow Tools

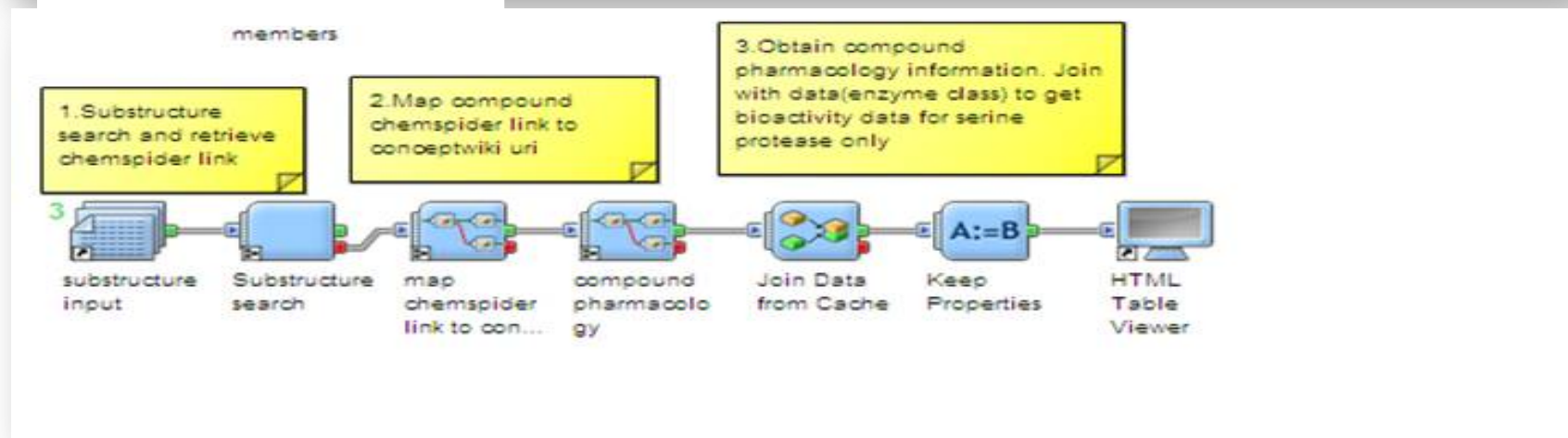
KNIME

Table View - 0:31 - Interactive Table (7 x 6)

File	Hilite	Navigation	View	Output							
S	Name	S	Inchi	S	Activity	S	Units	S	Relation	S	Target
..	Sorafenib	MLDQJTXFUGDVEO-UHFFFAOYSA...	3400	nM	=	Serine/threonine-protein kinase PLK4					
..	Sorafenib	MLDQJTXFUGDVEO-UHFFFAOYSA...	250	nM	=	MAP kinase signal-integrating kinase 2					
..	Sorafenib	MLDQJTXFUGDVEO-UHFFFAOYSA...	5.4	uM	=	HCT-116 (Colon carcinoma cells)					
..	Sorafenib	MLDQJTXFUGDVEO-UHFFFAOYSA...	1700	nM	=	Ephrin type-B receptor 1					
..	Sorafenib	MLDQJTXFUGDVEO-UHFFFAOYSA...	3300	nM	=	Dual specificity mitogen-activated protein kinase kin.					
..	Sorafenib	MLDQJTXFUGDVEO-UHFFFAOYSA...	6200	nM	=	Cyclin-dependent kinase 5					

Workflow Steps:

- File Reader: Simply gets the URL [I dont know how to get it to start otherwise!]
- Java Snippet: Fetch JSON from web
- Get Name and Inchi: Name & Inchi Grabber
- Get Activity: Now turn the activity JSON into rows
- Activity Parser: For each activity row, extract the columns we want
- Column Filter: Tidy Up: Remove Processing Columns Now
- Interactive Table: Node 31





The Open PHACTS community ecosystem





Becoming part of the Open PHACTS Foundation

A UK-based not-for-profit
member owned company

Members

- ❖ membership offers early access to platform updates and releases
 - ❖ the opportunity to steer research and development directions
 - ❖ receive technical support
 - ❖ work with the ecosystem of developers and semantic data integrators around Open PHACTS
-
- ❖ tiered membership
 - ❖ familiar business and governance model



Benefits

- ❖ **Access to a wide range of interconnected data** – easily jump between pharmacology, chemistry, disease, pathways and other databases without having to perform complex mapping operations
- ❖ **Query by data type, not by data source** (“Protein Information” not “Uniprot Information”)
- ❖ **API queries that seamlessly connect data** (for instance the Pharmacology query draws data from ChEMBL, ChemSpider, ConceptWiki and Drugbank)
- ❖ **Strong chemistry representation** – all chemicals reprocessed via Open PHACTS chemical registry to ensure consistency across databases
- ❖ **Built using open community standards**, not an ad-hoc solution. Developed in conjunction with 8 major pharma (so your app will speak their language!)
- ❖ **Simple, flexible data-joining** (join compound data ignoring salt forms, join protein data ignoring species)
- ❖ **Provenance everywhere** – every single data point tagged with source, version, author, etc
- ❖ **Nanopublication-enabled**. Access to a rich dataset of established and emerging biomedical “assertions”
- ❖ **Professionally Hosted** (Continually Monitored)
- ❖ **Developer-friendly JSON/XML methods. Consistent API** for multiple services
- ❖ **Seamless data upgrades**. We manage updates so you don’t have to
- ❖ **Community-curation** tools to enhance and correct content
- ❖ Access to a **rich application network** (many different App builders)
- ❖ **Toolkits** to support many different languages, workflow engines and user applications
- ❖ **Private and secure**, suitable for confidential analyses
- ❖ **Active & still growing** through a unique public-private partnership

Open PHACTS Project Partners



Pfizer Limited – Coordinator

Universität Wien – Managing entity

Technical University of Denmark

University of Hamburg, Center for Bioinformatics

BioSolveIT GmbH

Consorci Mar Parc de Salut de Barcelona

Leiden University Medical Centre

Royal Society of Chemistry

Vrije Universiteit Amsterdam

Spanish National Cancer Research Centre

University of Manchester

Maastricht University

Aqnowledge

University of Santiago de Compostela

Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

AstraZeneca

GlaxoSmithKline

Novartis

Merck Serono

H. Lundbeck A/S

Eli Lilly

Netherlands Bioinformatics Centre

Swiss Institute of Bioinformatics

ConnectedDiscovery

EMBL-European Bioinformatics Institute

Janssen

OpenLink

