

CBI学会 2019年大会 ランチョンセミナーLS-05

ユーザーフレンドリーな Web 多次元解析ツールと 超高速反応式検索ツールの紹介

ドットマティクス株式会社 ソルト・レブ、福山隆

日時:2019年10月23日(水) 12:00~13:30 401号室

多様な研究の結果から情報を抽出する方法には、複数の障害があります。中でも、通常、キュレートされたデータを統計/データマイニング分析に提供するには、多くの時間がかかります。分析もボトルネックの一つです。多数のデータマイニング手法が存在しますが、これらは統計学、化学情報学、またはバイオインフォマティクスの専門家によって最もよく使用されます。しかし、最近、有機化学者が容易に解釈できる方法が開発されました。医薬品化学者は、これらの技術を利用して生産性を高めることができます。期待されています。

ドットマティクスは、確立されたシステムプラットフォームに統合された新しいソフトウェアコンポーネントをリリースして、構造化された研究データに基づいてこのような分析を実行します。

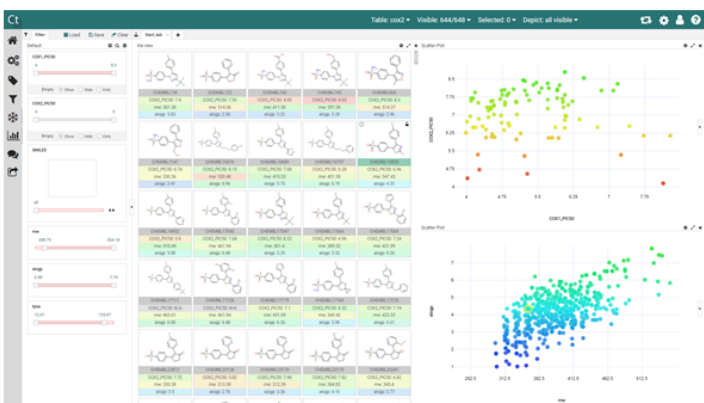
ドットマティクスのシステムは、共同研究ネットワーク全体の科学チーム間のコラボレーションに広く使用されています。さまざまなタイプの ELN に登録し、さまざまなデータソースからインポートすることにより、データを統合するように設計されています。ドットマティクス Browser は、複雑なクエリの設計と実行を容易にする一方で、高度な分析と豊富な視覚化には、強力な化学情報学デスクトップソフトウェアパッケージである Vortex の使用が必要でした。

Vortex は Browser に緊密に統合されていますが多くの機能がありエキスパート向けの製品です。一般的なユーザーからの要望を受け、完全に Web ベースのソリューションである Clarity をリリースしました。主に医療化学者を対象にしたこのソフトウェアは、R グループ分析、化学クラスタリング、マッチング分子ペアなどの広範な化学情報学特性計算と分析ツール、および専門的な 2D-SAR (構造活性相関) プロットなどを提供し、結果を導き出します。使いやすさと厳選した機能セットに重きを置いています。プラットフォームに緊密に統合され、ユーザーがアクセスできるデータソースまたはクエリを使用できます。

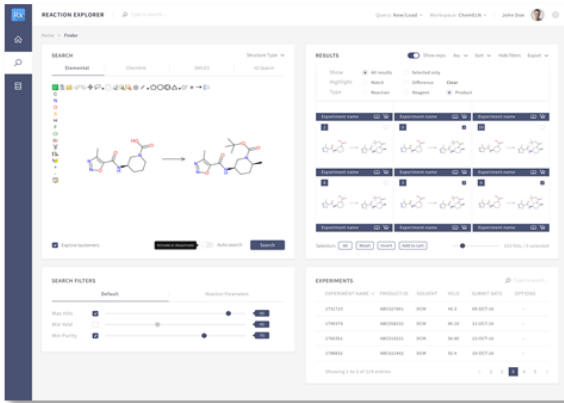
次に開発中の新製品をご紹介します。探索合成分野で電子実験ノート導入されて十年以上が経ち、大手製薬会社では何百万もの実験データが蓄積されています。この膨大なデータの中から有用な実験を検索・分析できる反応式検索ツール Reaction Explorer がある大手製薬会社の依頼により弊社で現在開発されています。

本ランチョンセミナーでは、強力な分析ツールと統合されたデータプラットフォームが、システム初心者の化学者が化学生物学情報から貴重な情報を抽出するのにどのように役立つかについて概要を説明します。

Ct Web解析ツール Clarity



Rx 超高速反応式解析ツール Reaction Explorer



Ga ドキュメント管理システム
Document management & sharing



Re 化合物登録管理システム
Chemical & sample registration



In 化合物・抗体インベントリー
Chemicals & biologicals inventory

Content		Barcode	
ABC-00010572A-001		60731	
IS SOLID	TARE	Amount	Amount Unit
Volume	Volume Unit	CONC	CONC UNIT
1.0	mL	10	mM
Comments			
DMSO stock solution			
QTY COMMENT			
Tecan aliquot			
Type			
Minitube			

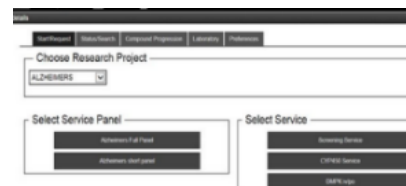
Rw 低分子反応・設計ツール
Reaction Work Flow



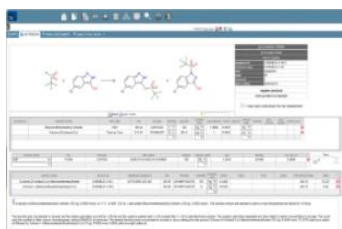
Bi 抗体・核酸登録管理システム
Biologicals registration & management



Ca 業務依頼・進捗管理システム
Work request and tracking

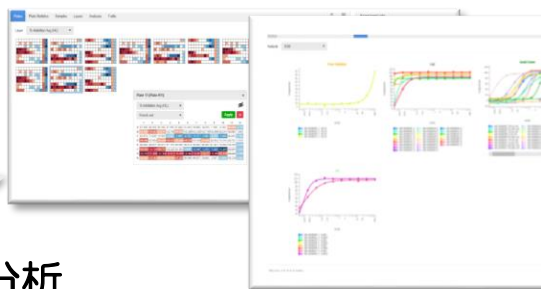


Stⁿ ケミカル・バイオ電子実験ノート
ELN for all



作る → テスト

St HTS/HCS スクリーニング管理システム
HTS & HCS screening management



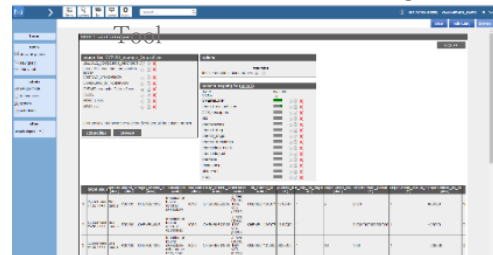
設計

Br ダイナミック・ブラウザー
Data federation, query and reporting



分析

Nu LTS アッセイアップロードツール
Excel / CSV / SD file DB Upload



Ch 超高速試薬データベース
ChemSelector/eMolecule

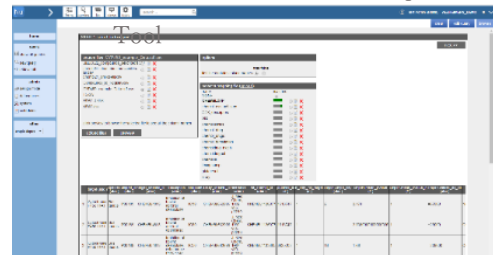


レポート

DO MS Office アドイン
Microsoft® Office add-in

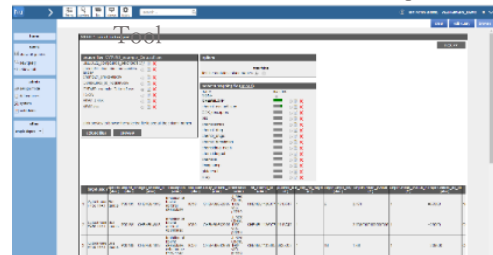
Lead compounds			
	X-10825	X-10826	X-10827
ID	X-10825, X-10829	X-10826, X-10828	X-10827, X-10827
mw (g/mol)	425.46 104 2.87	316.76 56 4.82	500.43 31.1 5.09
AI IC50 (µM)	43 IC50 (µM) 1564.68	43 IC50 (µM) 427.29	43 IC50 (µM) 302.05
PL	76.365	76.365	45.49

Nu LTS アッセイアップロードツール
Excel / CSV / SD file DB Upload

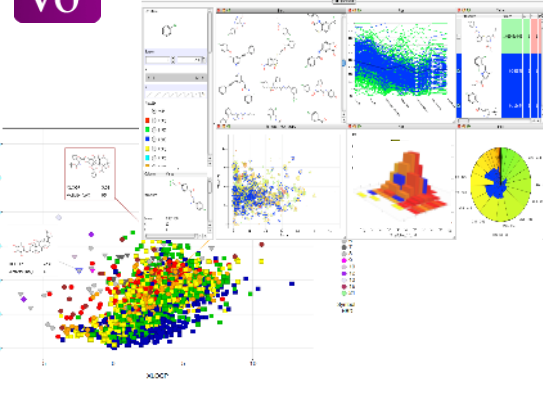


分析

Nu LTS アッセイアップロードツール
Excel / CSV / SD file DB Upload



Vo 超高速・多次元解析ツール
Interactive analytics & visualisation



ドットマティクス株式会社

〒101-0031 東京都千代田区東神田 2-10-9

THE PORTAL AKIHABARA 1F

電話: 03-4577-1480

Mail: jp_sales@dotmatics.com

Ct Web多次元解析ツール
Clarity

