

創薬インフォマティクス・ソフトウェア

Dotmatics社製品販売開始

Dotmatics社は2005年に設立され、医農薬・化学分野での研究開発における情報ソリューション・サービス・プロバイダーとしてグローバルに活動を展開しています。Dotmatics社は日本支店を2015年3月に開設し、企業向けのサービス展開を加速しています。菱化システムでは大学・官公庁向けにDotmatics社製品の販売を7月より開始しました。Dotmatics社の総合的なソリューションには、ナレッジマネジメント、データストレージ、エンタープライズ・クエリとレポート、データ解析と可視化のためのツールが含まれています。また、Dotmatics社における迅速な開発は、ユーザーの絶えず変化するニーズに適応し、最先端の高品質なプラットフォームを提供します。

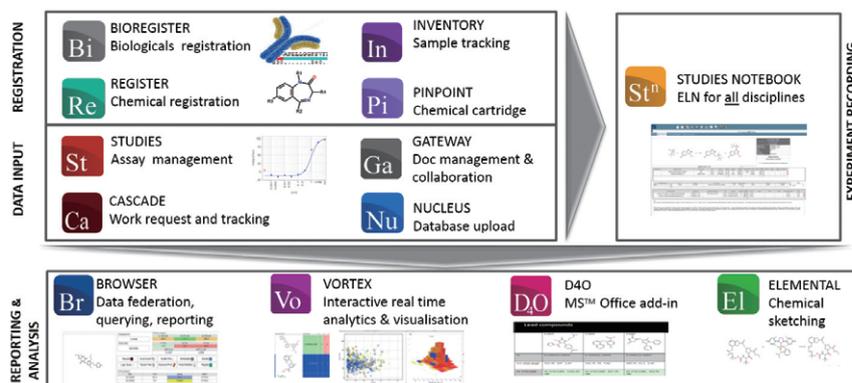


図1 幅広い研究データを包括的に管理できるDotmaticsのプラットフォーム

Contents

新製品情報

創薬インフォマティクス・ソフトウェア	Dotmatics社製品販売開始	2
化学データ可視化・解析ソフトウェア	CIMPL: SureChEMBLデータベース検索機能搭載	3
材料設計支援統合システム	MedeA: 最新版2.17リリース	4

技術情報

遺伝子発現データベース	GENEVESTIGATOR: Gene Search Tools	6
統合計算化学システム	MOEを利用したSBDDデータの管理	7
タンパク質立体構造データベースシステム	PSILO 2014.12リリース	8
研究情報共有システム	CBIS: 食品分野のR&Dでの活用	9
電子実験ノート	E-Workbook Suite: 導入事例ご紹介	10
量子化学計算ソフトウェア	ADF: 遷移金属錯体の項間交差とリン光	11
材料設計支援プラットフォーム	SciMAPS製品情報	12

創薬インフォマティクス・ソフトウェア

Dotmatics社製品販売開始



研究の現場では、リレー競技のように次々に人が入れ替わり、情報の伝達が続けられています。プロジェクトとともに、その研究に関わるリソース、研究者、学生などすべてが移り変わり、後には、次の世代に引き継がれるべき膨大な情報や知識が残されます。過去のデータを探索しつつ、現在進行中のプロジェクトを滞りなく進める力こそが、研究を成功させるためのキーファクターとなります。また、近年では、異なる大学や離れた地域のグループが共同で研究を行うことがますます重要になってきました。Dotmatics社の製品群は、コミュニケーションとコラボレーションを向上させつつ、より効率的に研究を行うことができるよう支援します。

■Dotmatics社製品の特長

Dotmatics社製品のプラットフォームは、柔軟性が高くWebベースの使い易い単一のシステムに化学データ、生物学データを集約しています。プラットフォームには複数のモジュールが統合されており、個々のモジュールの単独利用だけでなく、複数モジュールの同時利用や他のサードパーティー製品との組み合わせ利用も可能です。また、少人数の研究室から大規模の研究機関まで研究規模に応じてシステムを構築することが可能です。

例えば、創薬研究においては、化合物データの構築・登録、在庫管理、電子実験ノート、アッセイ評価など一連のモジュールが提供されており、データ解析・可視化モジュールと組み合わせることで意思決定を支援します。

ここでは、学術研究においてニーズが高いモジュールについて紹介します。その他のモジュールについては、以下のWebサイトをご参照ください。

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/dotmatics/index.html>

■データ収集

電子実験ノートStudies Notebookを利用して、標準的な実験手順に従い、データを保存することができます。柔軟なWebインターフェースとデータモデリングにより、化学から生物学へと簡単に複数の研究分野にノートブックを適応させることができます。Studies Notebookは、複数のグループと複数の地域間で共有することができ、共同研究を活性化します。最小限の導入負荷で実装可能なStudies Notebookは費用対効果が大きく、発表資料、学術論文に対する情報の質と量を維持し、知的財産保護に利用できます。

■データのクエリ作成と共有

Browserは、強力かつ柔軟性の高いデータ管理ソリューションです(図1)。クエリ作成や分析目的のために、内部および外部のパートナーと情報を選択的に共有することができます。管理者は、ユーザー、グループレベルに関連する情報のみにアクセスを許可するようにセキュリティ設定を行い、チームの知的財産権を保護します。Browserは、データソースのすべてを照会することができ、Studies Notebook以外にもRegister(化合物登録)、Pinpoint

(Oracleデータカートリッジ)、Bioregister(生物学データ登録)に密接にリンクされています。Browserにより別の研究プロジェクトの進捗状況をモニターすることが可能であり、例えば、プロジェクト予算の適切な執行を確認することができます。搭載のレポート機能は、プロジェクトや予算の根拠を示すだけでなく新たな提案書の作成にも利用できます。

■データの解析と可視化

Vortexは汎用性の高い総合的なデータの可視化と分析用のツールです(図1)。化学データの取扱いに優れており、分子構造の可視化にはサードパーティー製品は必要ありません。効果的かつ高速な方法で、数百万件のデータポイントを解析できるよう設計されています。インタラクティブな複数のデータプロット、グラフ、表、フィルターは統計解析ツールと相まって、膨大なデータに隠れている情報を明らかにすることができます。Vortexは、データベースに格納されたデータを継目なく照会し分析するためにBrowserと組み合わせ使用することができます。

■Microsoft製品との連携

D₄O(Dotmatics for Office)は、Microsoftアプリケーションのアドオンモジュールであり、スプレッドシート内で化学構造の可視化を可能にします。Microsoft製品であるExcel、Word、PowerPoint、Outlookのすべての処理能力をDotmaticsの化学特性の計算機能や検索機能と組み合わせ利用することができます。



図1 Browser(左)とVortex(右)