Scilligence 社製研究情報管理統合プラットフォーム

Scilligence Focus の紹介（1）

Scilligence 社製統合プラットフォームの新製品 Focus は、化学や生物学のデータセットで複雑な分析を行うためのウェブベースのデータ解析・可視化ツールです。RegMol の登録データと外部ソースからインポートしたデータを統合的に扱えます。SAR 解析機能では R グループ分解が簡単に行え、可視化ツールではさまざまなタイプのチャートでデータのソートやフィルタリングを行えます。本稿では、新製品 Focus の機能を紹介します。

創薬研究と Focus

創薬研究では化合物をデザインし、合成し、アッセイによる評価を行い、解析するという一連の流れがあります。この一連の流れには、データの管理や複数の研究者による共同作業が伴います。従来の Scilligence 社製品では、ELN による合成実験やアッセイの記録や、RegMol による分子情報およびアッセイデータの管理や簡単な解析が可能でした。

新製品 Focus では、化学や生物学の複雑なデータセットを用いたより高度なデータ解析・可視化が行えます。それにより、創薬研究に伴う研究データ管理と解析も Scilligence 社製品のプラットフォーム上で統一的に行うことが可能となります。その結果、研究の一連の流れをスムーズに進められるように、また複数の研究者間で実験結果や解析結果、可視化したチャートなどを簡単に共有できるようになります。

データアクセス

Focus は RegMol の Assay View で作成したデータセットを直接読み込んで解析や可視化を行えます。RegMol の Assay View は、分子やプロジェクト、アッセイプロトコルなどに基づいてアッセイ結果を集約し、表示する機能です。また、他のデータソースとして API を用いて外部のデータベースと連携して読み込んだデータや、SD ファイルや CSV ファイルなどでアップロードしたデータを用いることもできます。

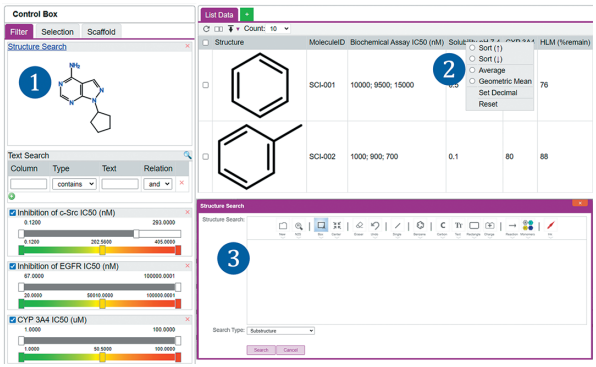


図 1. 解析や検索機能
①フィルタリング機能 ②ソート機能 ③検索機能

データ解析

RegMol やデータベースから読込んだデータはフィルタリングやソートによる解析が可能です（図 1）。検索機能も充実しており、構造や配列、HELM による検索で膨大なデータセットの中から目的とする化合物群の結果を表示し、解析できます。

データの可視化

Focus の可視化ツールではさまざまなタイプのチャートでデータを表示することが可能です。化合物の活性や関連情報を、散布図・棒グラフ・折れ線グラフ・レーダーチャートを用いて視覚的に確認できます（図 2、図 3）。

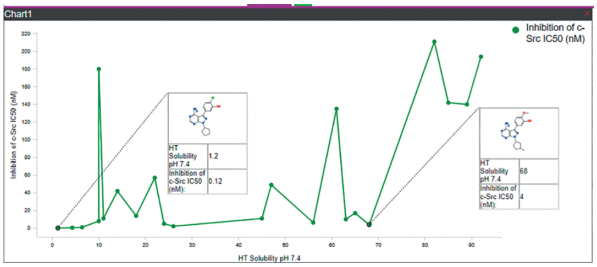


図 2. 折れ線グラフ
折れ線グラフを用いて IC_{50} の値を化合物ごとに比較。プロット部分にカーソルを合わせると化合物の情報が表示される。

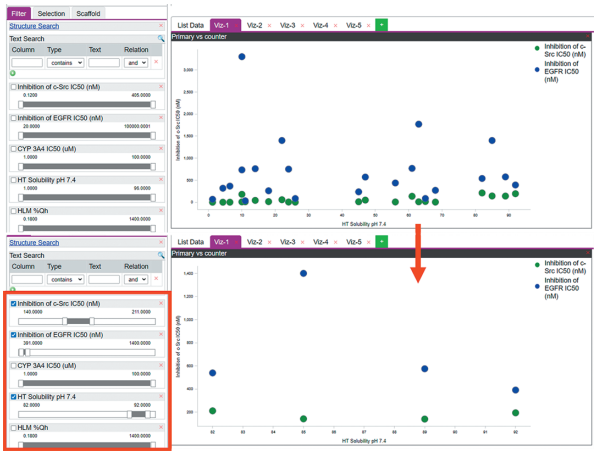


図 3. 散布図
プロパティーごとのスライダー（赤枠内）や構造検索・テキスト検索でデータをフィルタリングすることで範囲内にある化合物に絞り込んで表示できる。

Scilligence 社製研究情報管理統合プラットフォーム

Scilligence Focus の紹介（2）

SAR 解析

SAR

Focus の SAR 解析は非常にシンプルな操作で行うことが可能です。構造検索ツールからクエリー構造を指定すると、フィルタリングと解析を行えます（図 4）。

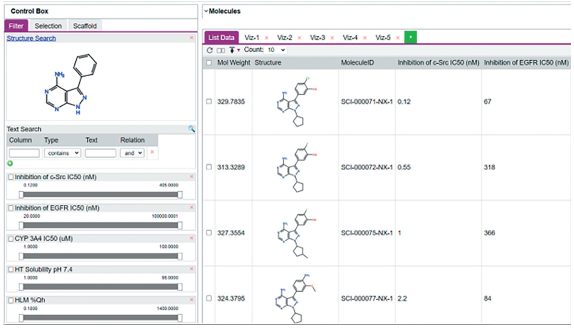


図 4. 左上の構造検索ツールからクエリー構造を指定

R グループ分解

R グループ分解では Scaffold を定義してレーダーチャートを表示すると、共通パターンや Scaffold Hopping の影響を確認できます（図 5）。

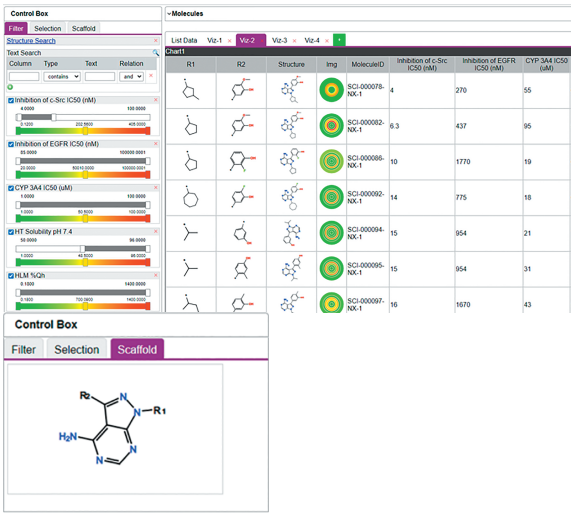
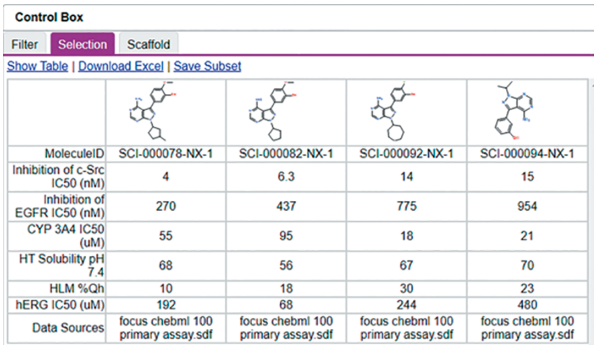


図 5. R グループ分解
上：レーダーチャート、下：定義した Scaffold

データの選択

SAR 解析したデータは注目する化合物などで選択して、ピボットテーブルにできます（図 6）。また、選択した化合物のサブセットの保存や解析データの出力も可能です。



Control Box

Filter | Selection | Scaffold

Show Table | Download Excel | Save Subset

MoleculeID	SCI-000078-NX-1	SCI-000082-NX-1	SCI-000092-NX-1	SCI-000094-NX-1
Inhibition of c-Src IC50 (nM)	4	6.3	14	15
Inhibition of EGFR IC50 (nM)	270	437	775	954
CYP 3A4 IC50 (uM)	55	95	18	21
HT Solubility pH 7.4	68	56	67	70
HLM %Qh	10	18	30	23
hERG IC50 (uM)	192	68	244	480
Data Sources	focus chebml 100 primary assay.sdf	focus chebml 100 primary assay.sdf	focus chebml 100 primary assay.sdf	focus chebml 100 primary assay.sdf

図 6. 選択した化合物の解析データから作成されたピボットテーブル

まとめ

Focus はブラウザー上でさまざまなタイプのチャートやオプションを使用して、多様なデータセットを可視化できます。シンプルな操作で可視化や SAR 解析を行うことができ、RegMol や外部のデータベース、ファイルからデータを取り込めるので、得られたアッセイ結果などに基づいて効率的に解析することが可能です。

ご試用

Scilligence 社製品を一定期間無償でご評価いただけます。Scilligence 社製品にご興味がある方はぜひお試し下さい。トライアルをご希望の方は弊社ウェブサイトよりお問い合わせ下さい。

https://www.molsis.co.jp/contact/

- 弊社ウェブサイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- 電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバー（RSI ニュースレターを含む）は、弊社ウェブサイトをご覧ください。
- 本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトのご担当者様にお送りしています。その他に発送のご希望がございましたら弊社までご連絡ください。
- 記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

MOLSIS ニュースレター
No. 19, 2021.10
2021 年 10 月 1 日 発行
発行所 株式会社モルシス
Copyright © 2021 MOLSIS Inc.

株式会社モルシス
URL: https://www.molsis.co.jp/
TEL: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp