



ActivityBase XE, SARViewのご紹介

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社
流通・エンタープライズ事業グループ
ライフサイエンス事業部

2017年4月28日



- 1989年 イギリスで設立
- 設立当初は創薬/探索部門対象のコンサルティングがメイン
- 1993年に Activity Base を開発/リリース
- 2006年に電子実験ノートE-WorkBook・BioBookを開発/リリース
- 本社：イギリス、社員数：325名（その他アメリカ3カ所、中国、豪州に拠点）
- 製品の向上ならびに周辺製品の拡充により、創薬/探索以外にも、GMPを含む前臨床、農薬、化学、化粧品、食品分野などにもマーケットを拡大

XE 概要

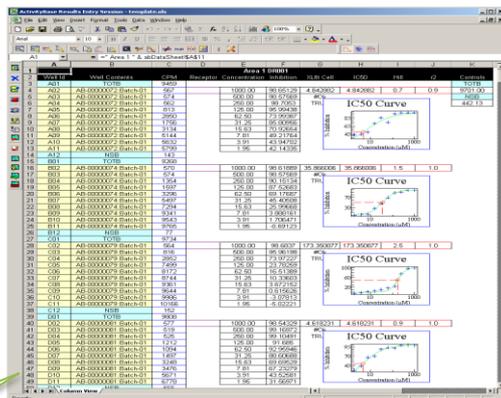
- 従来のExcel Templateと併用して使える、高機能Template

ActivityBase Client

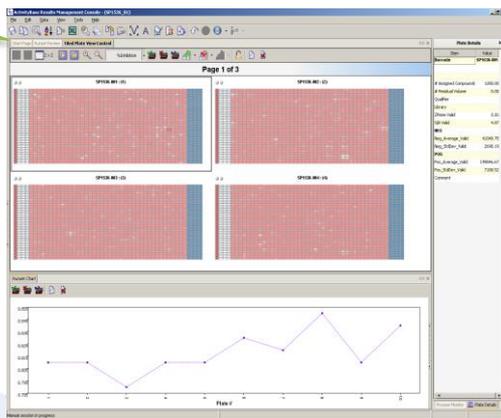


同一のProtocolで2つのTemplate typeを設定可能

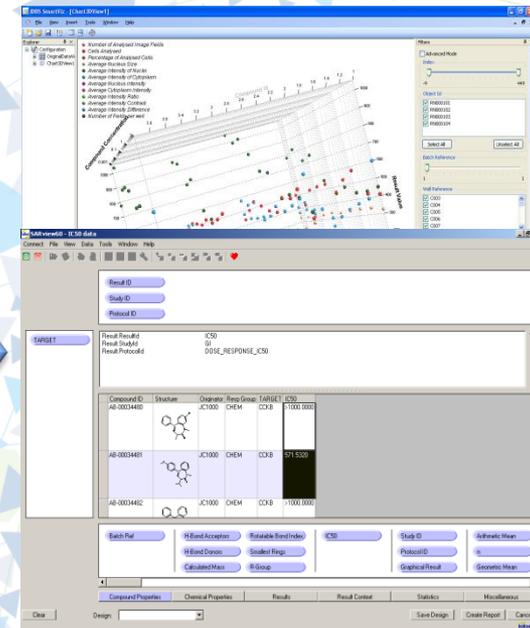
Excel with XLfit



XE with MathIQ



Reporting tool



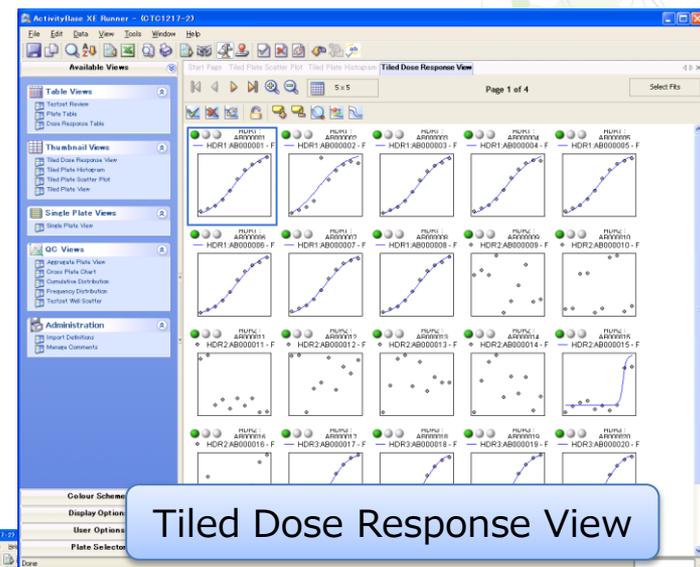
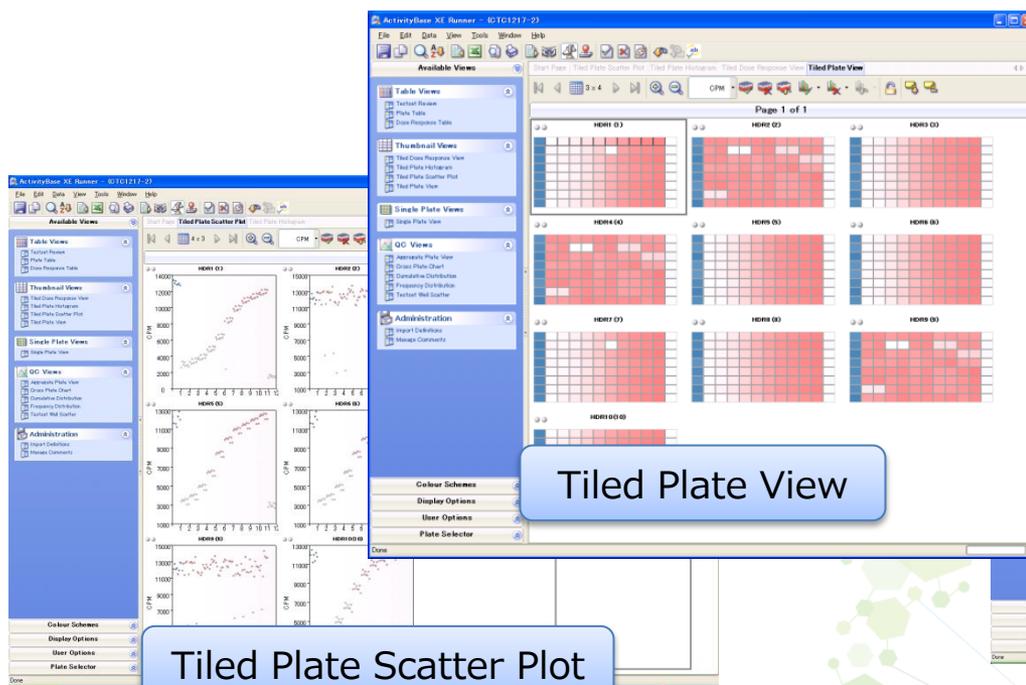
ABase XE の特徴 (概要)

- 計算処理、登録処理のパフォーマンスが飛躍的に向上
 - UHTS業務にフォーカスし、384Template100枚、1000以上のDose Response カーブをストレスなくハンドリング可能
 - デモ環境での実績では384x100枚の処理に1~2分程度、同様に 1200程度のDRカーブの計算・描画も2~3分にて対応。 ※パフォーマンスはH/W環境に依存します。
- ExcelのTemplateよりも向上したチャート（QCにフォーカス）機能
 - Histogram、Scatter plot、Plate Viewといった各グラフが標準装備され、Tile形式に複数表示可能
 - チャート上からデータのValidation、Reject処理や他のチャートや表へのジャンプなどが可能（データ修正された情報はOracle側へ自動反映される（随時））
- フレキシブルな実験に対応したTemplate
 - 各ウェルのCompound IDや濃度をXEが判断し、n=2のレプリケーションやDose Responseを計算。したがってTemplate上でプレートフォーマットを固定する必要がなく、異なるプレートフォーマットを使用してもTemplateを変更する必要がない。
- Automatic Validation機能
 - QC対応にフォーカス、Zprimeの値やRejectしたコントロールウェルの数などから自動的にプレート全体の棄却が可能。（CTRL を半分以上Rejectしたらそのプレートは全てReject, など）

XEの特徴 -多彩なView機能-

Test Validationを効率的に行えるよう、様々なViewが用意されている。

- チャート上から直接Knock-Outなどの処理が可能
- チャートの表示個数は随時変更できる
- 表示色の設定も自由



Tiled Dose Response View

Tiled Plate View

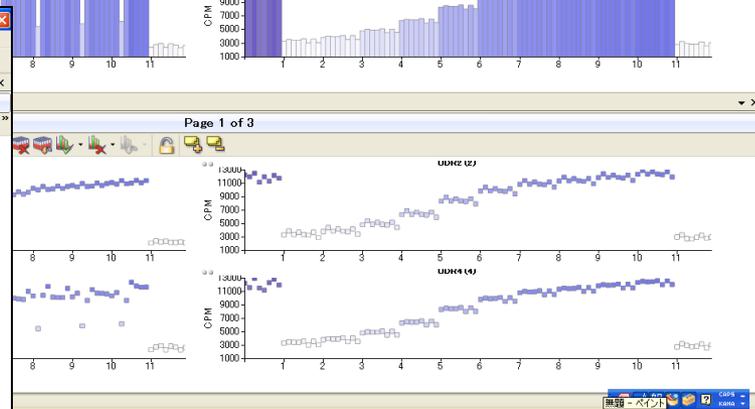
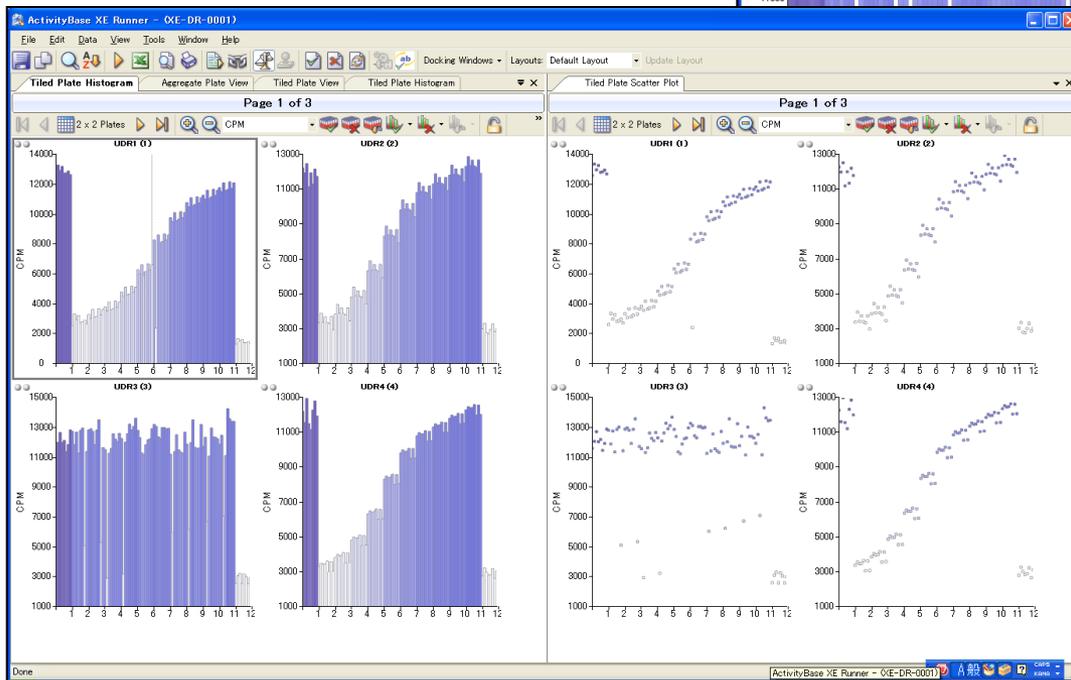
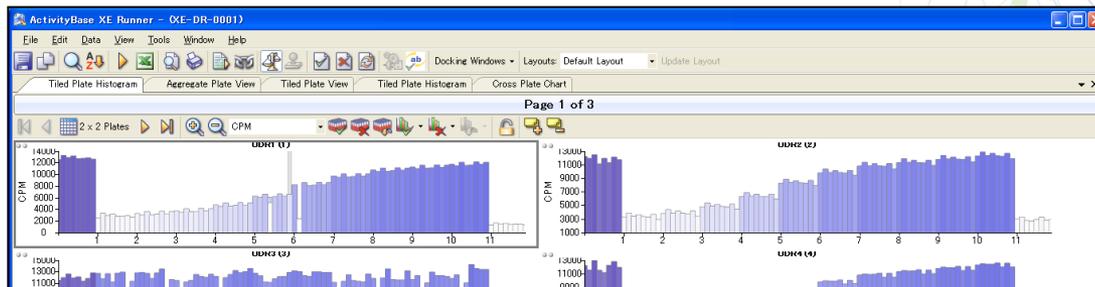
Tiled Plate Scatter Plot

Tiled Plate Histogram

XEの特徴 -多彩なView機能の応用-

各Viewerを上下や左右に並べて表示させることが可能

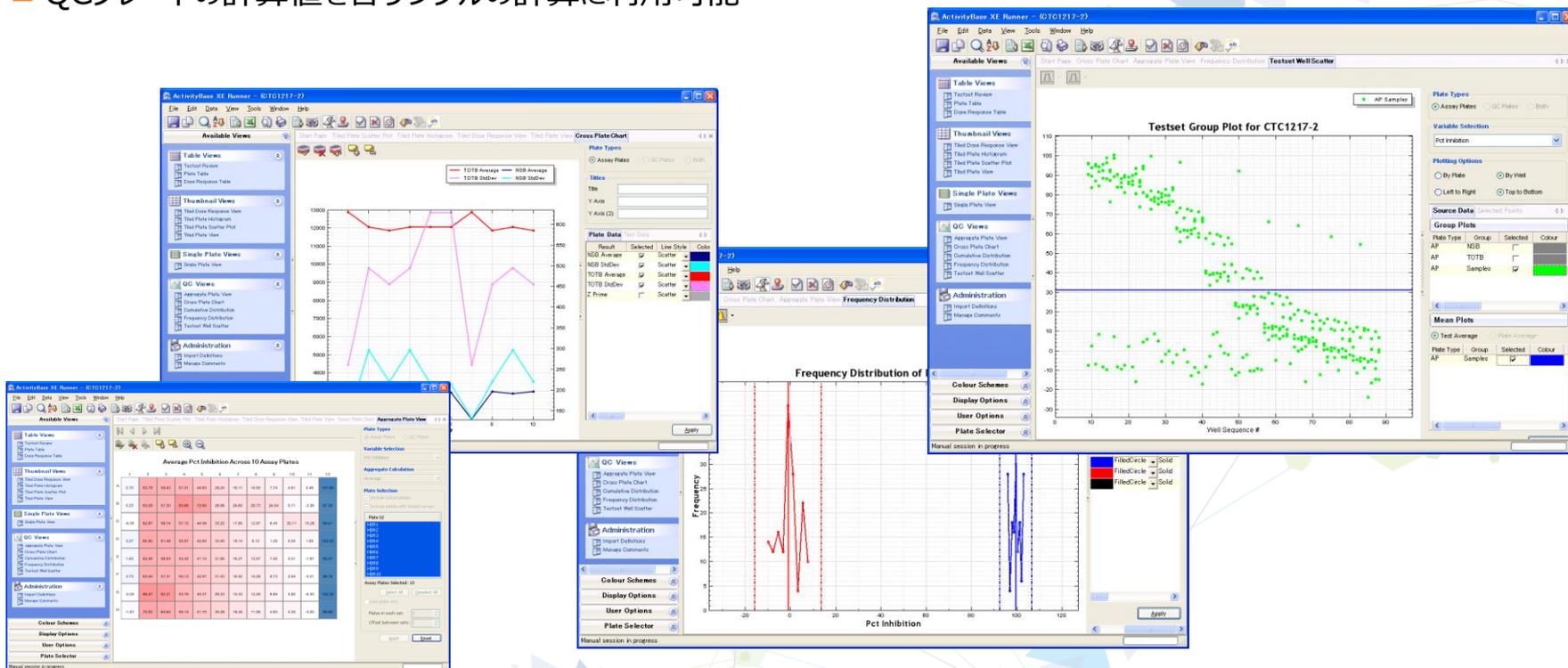
- それぞれのViewerで表示しているPlateは連動している



XEの特徴 -QC機能/QCプレート対応-

プレート単位（プレート内）、Testset単位など様々なQC指標が計算でき、推移等をVisualize可能。また、QCプレートについてもハンドリングし、QCプレート用のViewも用意されている

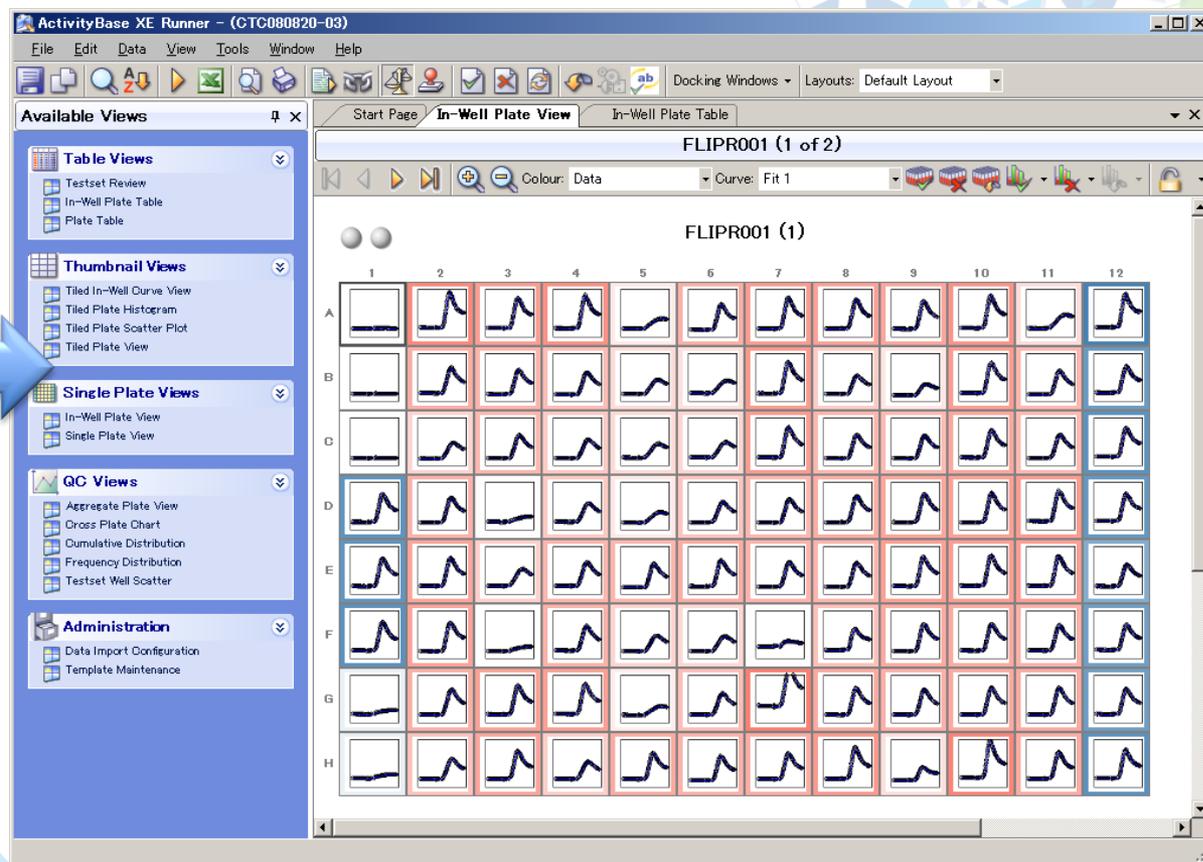
- QC用のVisualization View
- ZPrime, Z, Control Ave, S/Bなどプレート単位やTestset単位で計算されるQCパラメータもABase内に保存可能
- プレートのバーコードIDから自動的にQCプレートを判断
- QCプレートの計算値を各サンプルの計算に利用可能



XEの特徴 -Kineticデータのサポート-

- Molecular Devices "FLIPR®"、浜松ホトニクス"FDSS"などで解析されるCellベースのKinetic Assay Dataをサポート。
- rawdataファイル内の時系列データを全て取り込み、プロットします
 - このWell内時系列データを元にMax、Min値等を取得し、Well代表値とします
 - Well代表値からの計算（例えば特定のTime Pointでのレシオ計算など）も可能

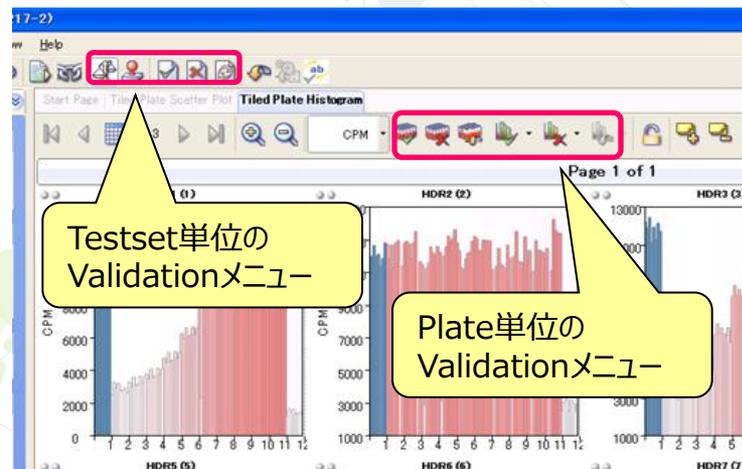
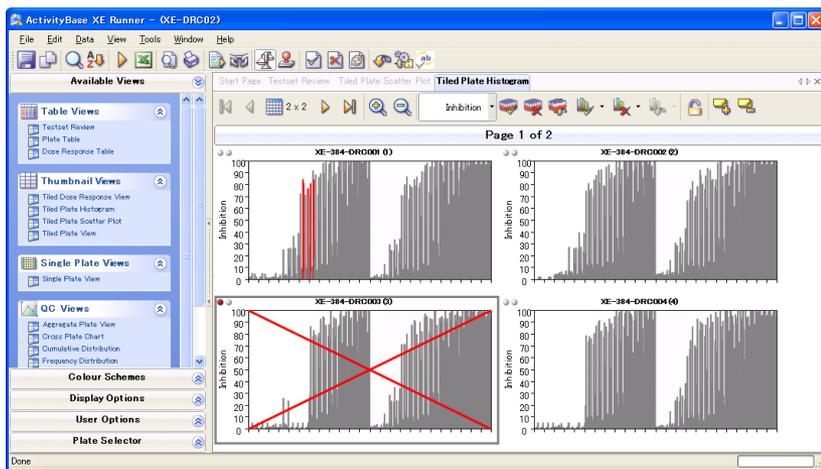
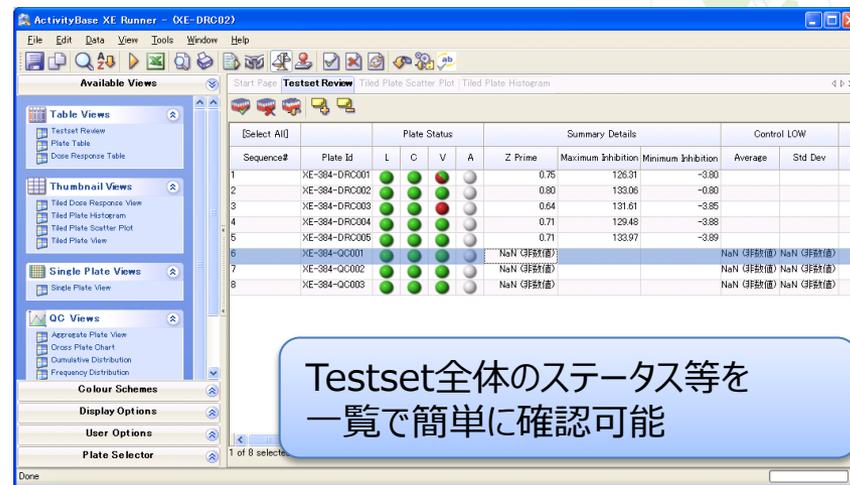
Y No	Y"	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8	A9
0	0.822	0.913	0.873	0.841	0.822	0.689	0.811	0.818	0.774	
5060	0.817	0.91	0.896	0.844	0.824	0.691	0.804	0.816	0.772	
10121	0.82	0.91	0.871	0.841	0.827	0.696	0.814	0.823	0.776	
15182	0.815	0.91	0.862	0.836	0.818	0.685	0.802	0.814	0.772	
20243	0.815	0.911	0.865	0.832	0.821	0.687	0.8	0.811	0.773	
25304	0.812	0.906	0.861	0.84	0.812	0.685	0.807	0.811	0.766	
30365	0.818	0.915	0.865	0.837	0.821	0.684	0.803	0.819	0.765	
35426	0.812	0.911	0.864	0.838	0.819	0.685	0.802	0.812	0.769	
40487	0.82	0.906	0.853	0.834	0.824	0.682	0.797	0.817	0.769	
45548	0.811	0.904	0.86	0.832	0.821	0.684	0.798	0.811	0.764	
50609	0.809	0.899	0.855	0.83	0.816	0.686	0.802	0.816	0.767	
55670	0.815	0.906	0.866	0.834	0.812	0.686	0.804	0.815	0.771	



XEの特徴 -Knock-out/Validation-

XEでは、従来Excel Templateで行っていた2ステップでのKnock-out、Validation (Verify/Unverify)機能が簡略化され、XE Template上でKnock-out処理とValidationが行える

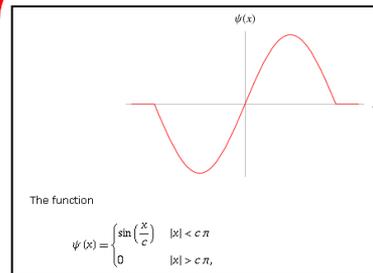
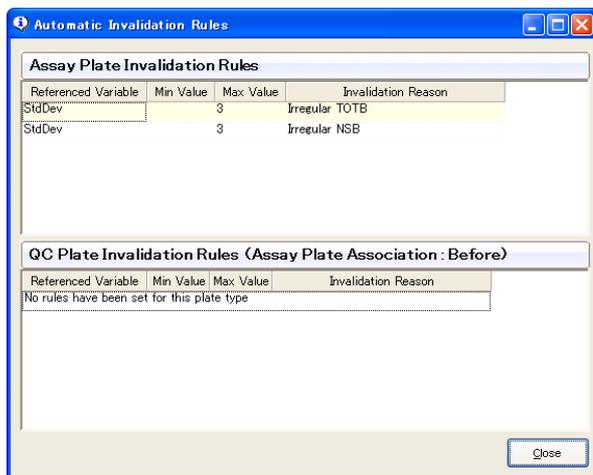
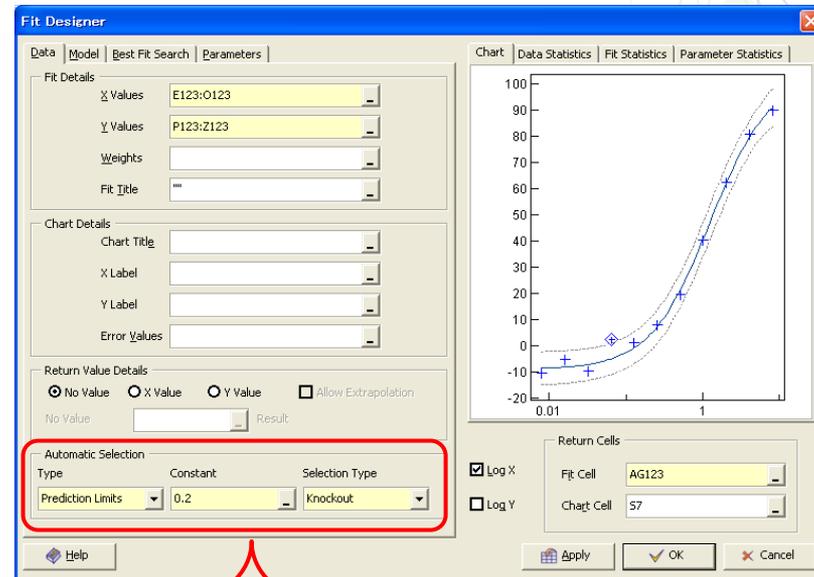
- 各チャート上から直接Knock-out(Invalid)
 - 各Well単位 (個別)
 - プレート全体
 - 特定のWellを串刺し
 - QCチャート (whole testset)上での処理
 - 3SD等計算値ベースでのKnock-outなど



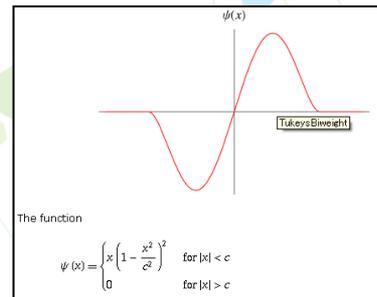
XEの特徴 -Automatic Knock-out-

XEでは、さらに不正値を自動的にKnock-outする Automatic Knock-out機能が用意されている。この機能を利用することで、解析スピードの短縮と統一された基準による確実なパラメータ計算を支援する

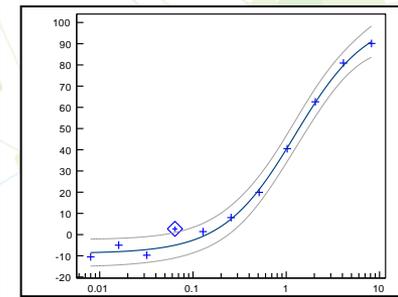
- 一般的なCriteriaによるKnock-Out (SD値によるCTRL, BLANKのKnock-outなど)
- IC50カーブにおける統計値ベースのKnock-Out
 - Andrew's Sine
 - Tukey's Bi-Weight
 - Prediction Limits (信頼区間によるKnock-out)



Andrew's Sine



Tukey's Bi-Weight

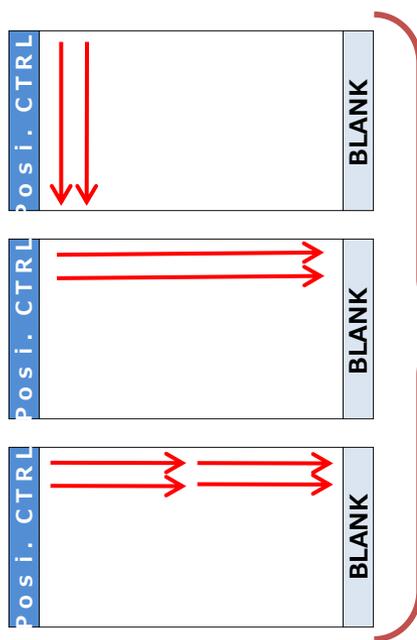


Prediction Limits

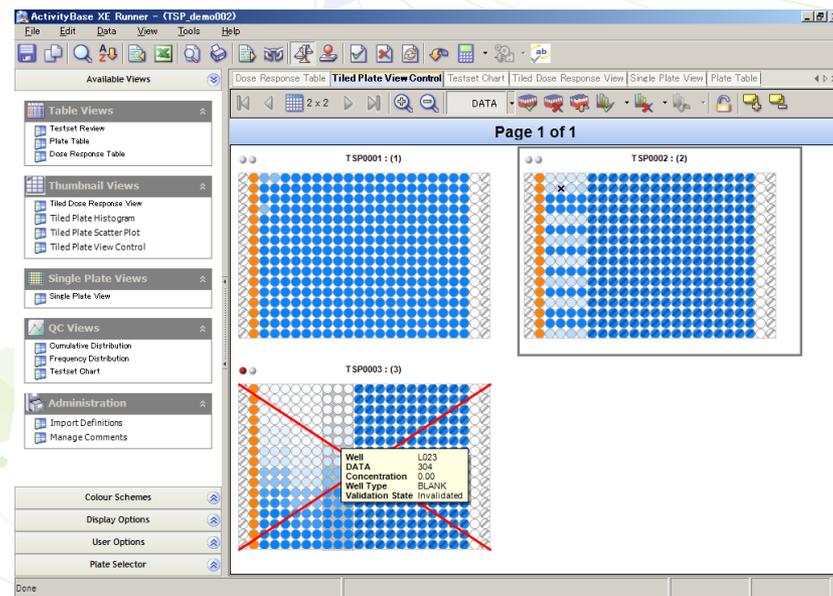
XEの特徴 -flexibleなPlateレイアウト設定-

XE では、プレート上のCompound IDと濃度を認識し、自動的に計算を行うことが可能
そのため、プレートフォーマットが異なる毎にTemplateを再作成する必要がない

- 同じCompound ID で同じ濃度の場合、Replication (n=2など) と認識し、自動的にAverage を計算
- 同じCompound ID で濃度が異なる場合、Dose Responseであると認識し、自動的にIC50を計算
- プレート間に跨るn=2やDose Responseでも同様に計算可能。
- 1 Testset内に異なるDoseパターンのプレートを混在させることも可能。
- Control/Blankの位置についても、生データの数値レンジをベースに自動的に判別、計算可能

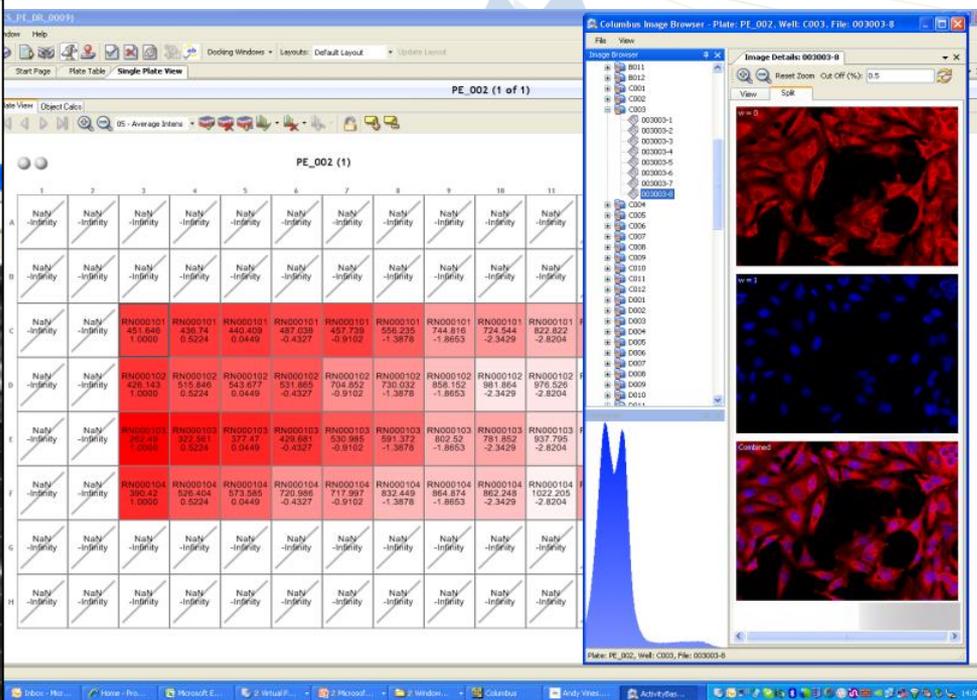
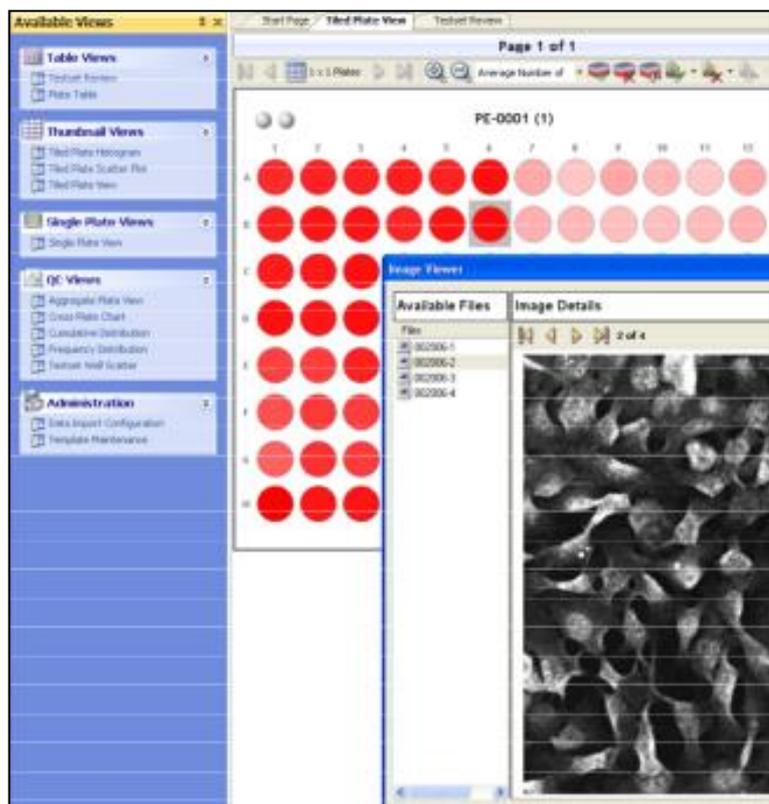


異なるDoseパターンを
一つのTemplateで
対応可能



HCS 対応

- Thermo Cellomics and PE Columbus image store対応
 - その他測定器への対応についてはご要望に応じて対応致します。



IDBS SARview のご紹介

SARview とは

- 構造式を始めとしたChemistry情報と様々な生物試験データを検索するレポートツール
- データソースはIDBS製品のみならず、通常のOracleデータベースであれば全て検索可能
- 3種類の出カレイアウト
 - SARview -SAR形式
 - Profile View - 1化合物に対する様々なプロファイルデータを表示
 - Tile View -複数の構造式をグリッド形式で表示
- 数値や文字データだけでなく、画像やグラフデータも表示可能
- Microsoft Excel、SD File、テキストファイル等様々なフォーマットに出力可能
- pdf ファイル経由で印刷可能
- Data Visualization 機能

SARview -基本的な検索-

フォームを事前に設定されたリストから選択し、検索条件を設定して検索を行います。

フォームを選択

フォームのイメージを表示 (Preview)

Compound ID	Structure	Purity	PAMPA	Lysa	CL	Study ID: DEMO-CH Protocol ID: TOPO-VITRO Protocol Version: 1 IC50(1)	Study ID: DEMO-CH Protocol ID: TTC-BBR-VITPULSE Protocol Version: 1 IC50(1)	Study ID: DEMO-CH Protocol ID: TTC-TUBI-VITPULSE Protocol Version: 1 IC50(1)	S.D.
CH0010497-000		99.060		32.400	0.400		-0.020	0.960	0.05C
CH0010497-000		99.060		25.190	0.400		-0.020	0.960	0.05C
CH0057472-000		100.000	9.470	0.180				0.670	0.97C

検索条件設定パネル
検索条件には数値や文字の条件の他、部分構造検索等も可能です。

検索先の選択。DBへの検索か、検索結果に対する絞り込みかを選択可能

Where results created or modified

Compound ID	Structure	Purity	PAMPA	Lysa	CL	DOPAMINE IC50(1)	DOPAMINE IC50 Curve	DOPAMINE r2	DEMO-CH TTC-VITCB IC50
CH0010497-000 CH0057472-000 CH0138075-000 CH0189596-000		SSS Ignore				<input type="checkbox"/> Exists		<input type="checkbox"/> Exists	<input type="checkbox"/> Exists
CH0057472-000		100.000	9.470	0.180		24.291		0.808	0.970
CH0138075-000		100.000	17.320	2.750		57.265		0.994	0.120
CH0138075-000		100.000	17.320	6.660		57.265		0.994	0.120
CH0059336-001		98.510	1.370	97.500		46.785		0.994	0.290
CH0010497-000		99.060		32.400		46.931		0.996	0.050

Profile View

Profile Viewは、一つの化合物に対する様々なプロパティ情報を表示するための画面レイアウトです。SARviewで選択しているデータの他、その化合物が他の試験ではどのような結果だったのか、などを網羅的に表示することも可能です。

Compound Id: CH0186596-000

Compound ID: CH0186596-000
Batch Ref.: CH0186596-000-002

Molecular Formula:
Molecular Mass:
BP (Upper):
MP (Upper):
Log P:

MDO Parameters
Purity: 100
AUC:
CL:
Solubility:
Stability: 5000
Lyss:
PAMPA: 3.4458

Study	Protocol	Test Occasion	Testset	Result	Result Value	Result Unit
DOPAMINE IC50(1)						
42.644807						
DOPAMINE IC50 Curve						
CHDR-0001:CH0186596-000						
IC50 = 42.64						
DOPAMINE IC50						
0.989						
DEMO-CH TBU2-VTUCB IC50						
0.71						

Study	Protocol	Test Occasion	Testset	Result	Result Value	Result Unit
DEMO-CH	TOPO-VITRO	REG1019-2		IC50	-0.2	
DEMO-CH	TBU2-VTUCB	REG1019-1		IC50	0.71	
DEMO-CH	TTC-BBR-VTPU	REG1019-3		IC50	0.4	
DEMO-CH	TTC-TUB1-VTP	REG1019-4		IC50	0.48	
DOPAMINE	REC-DR		CTC1020-IC50	IC50	42.644807	µM
DOPAMINE	REC-DR		CTC1020-Hill	Hill	0.752	
DOPAMINE	REC-DR		CTC1020-r2	r2	0.989	

- ActivityBase以外のOracleのデータベース項目をリンク可能
→ ISISの化合物情報など
- Report Table = SARviewで選択した項目
Database Table = ABase内の全試験結果
- Report Table内にGraphical Resultを表示可能

SARview で選択しているデータ項目

ActivityBaseに保存されている全ての試験結果

Tile View

Tile Viewは、表形式で複数の構造式やグラフを同時に表示出来るViewです。
スケールを変更することで構造式・グラフの大きさや一度に表示する数を変更可能です。
表示するデータ項目はSAR形式で選択した項目の中から選択します。

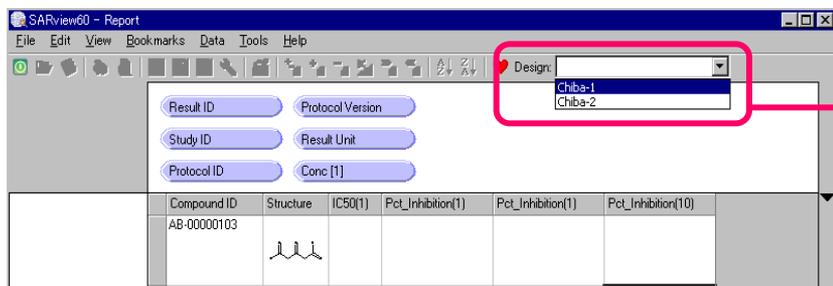
表示項目を選択

The screenshot displays the SARView - Report interface. On the left, the 'Design' menu is open, showing a list of items to be displayed: Compound ID (checked), Purity, PAMPA, Lysa, CL, DOPAMINE 1C50(1) (checked), DOPAMINE r2 (checked), and DEMO-CH TBU2-V. (unchecked). The main area shows a grid of 20 chemical structures, each with its corresponding SAR ID and a numerical value. For example, the first row contains structures with IDs like CH0010497-000 and values like 46.93. On the right, a zoomed-in view of the graphs shows sigmoidal curves with data points and a fitted line. The y-axis is labeled 'C50 =' followed by a value. At the bottom right, a 'Scale Slider' is visible, which is used to adjust the size of the displayed structures and graphs. A red arrow points to this slider.

スケールスライダー

Save / Export 機能

SARview では、検索結果のデータセットの他、各画面レイアウトや検索条件を、“Favourite”としてデータベースへ保存することが可能です。また、データベース以外にファイルへの保存も可能です。



データベース中に “Favourite”としてデザインや Queryを保存することが可能



The screenshot shows a Microsoft Excel spreadsheet with the following data:

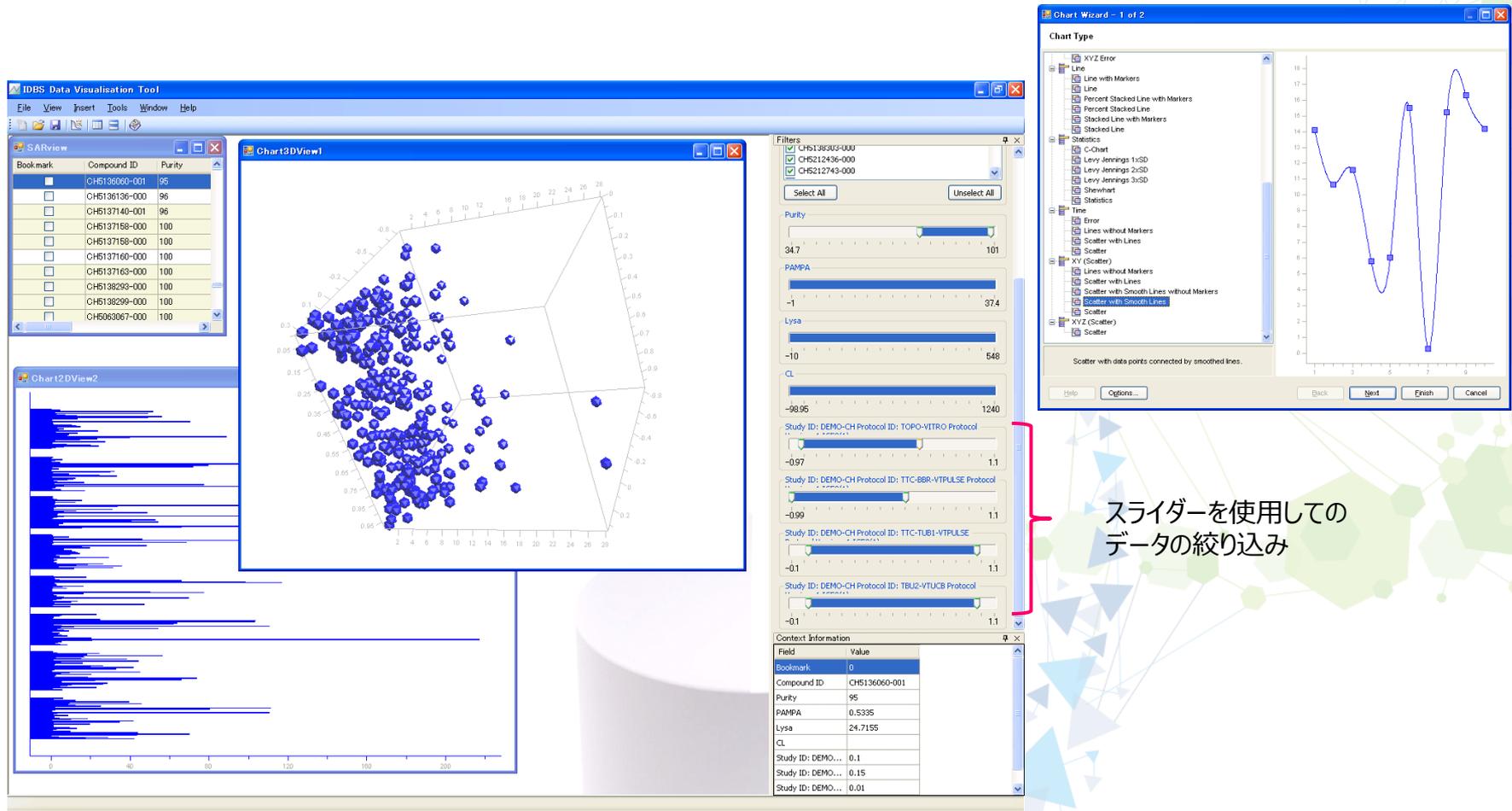
F2	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	COMPOUND ID	STRUCTURE	IC50(1)	Max_Conc(1)	AUC(1)						
2	AB-00000001		0.73	0.90	0.73						
3	AB-00000002		1.02	0.01	1.02						
4	AB-00000003		0.87	0.21	0.87						
5	AB-00000004		1.45	0.72	1.45						

Export 機能では以下のフォーマットをサポート

- MS-Excel フォーマット
- SD File
- SARview データファイル

Data Visualization

検索結果をチャート・グラフなど、視覚的に表示することが可能です。



スライダーを使用してのデータの絞り込み

画面デザイン -SARview-

デザインは Designer 上で行います。Designer画面下のデータ項目タイトルをマウスでドラッグ & ドロップして項目を選択していきます。編集時はレポートイメージがプレビューされるためデザインの作成や修正が容易です。

作成されたフォームはデータベース中に保存されます。

- データ項目の選択
- ヘッダ (タイトル) の編集
- 表示桁数やScientific notation設定
- ピボット設定

検索したいデータ項目を選択
(マウスでドラッグ & ドロップ)

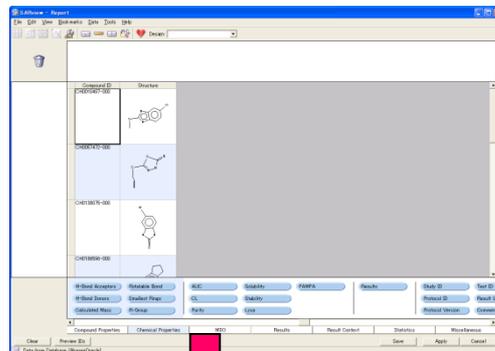
☆参照先データベースのmapping 設定
をすることでフィールド/データ項目のアイテム
が変更されます

The screenshot shows the SARview - Report window. The main area displays a table with columns for Compound ID and Structure. Below the table is a configuration panel with various data item selection buttons. A red arrow points from the text '検索したいデータ項目を選択 (マウスでドラッグ & ドロップ)' to the configuration panel. Another red arrow points from the text '☆参照先データベースのmapping 設定...' to the same panel. The configuration panel includes buttons for H-Bond Acceptors, Rotatable Bond, AUC, Solubility, PAMPA, Study ID, Test ID, H-Bond Donors, Smallest Rings, CL, Stability, Protocol ID, Result L, Calculated Mass, R-Group, Purity, Lysa, Protocol Version, and Comment.

Compound ID	Structure
CH0010497-000	
CH0057472-000	
CH0138075-000	
CH0186596-000	

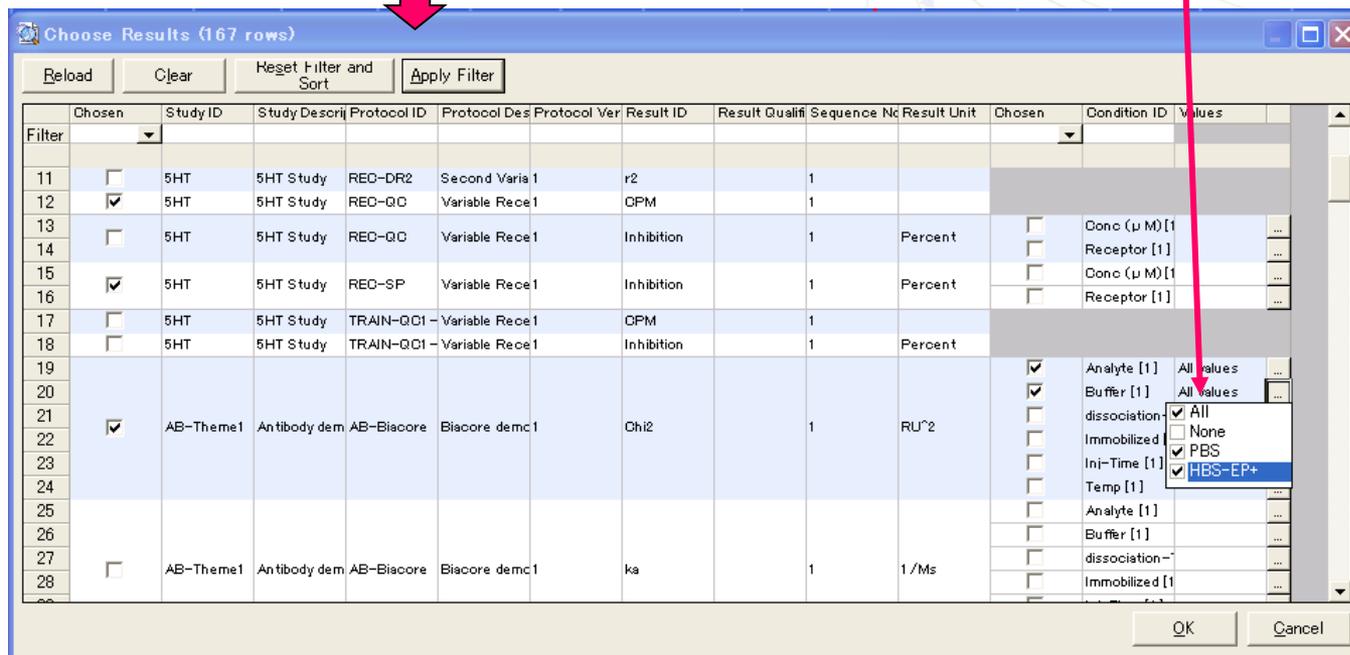
アッセイ系の選択

“Result”を選択した場合、どのResultを表示するか一覧から選択する。



表示する実験条件もチェックボックスで選択

チェックボックスで、表示する試験系（テーマ、プロトコルなど）を選択



表示レイアウトの調整

不要なカラムの削除やピボットिंगが簡単な操作で行えます。

不要なカラムは列、もしくはアイコンをマウスで選択して外へ出すことで削除

%Inhibition (0.1uM)	%Inhibition (1.0uM)	%Inhibition (10uM)
12%	67%	93%

The screenshot shows the SARview60 - Report window. On the left, there is a 'Column Area' with a list of columns: Result ID, Protocol Version, Study ID, Result Unit, Protocol ID, and Test ID. The 'Test ID' column is highlighted with a red box. A red arrow points from this box to the 'Raw Area' on the right. The 'Raw Area' contains a table with columns: Compound, Structure, Test ID, IC50(1), Test ID, Conc [1], Pct_Inhibition(1), Test ID, and AUC(1). A yellow callout box over the 'Raw Area' contains the text: 'ピボットिंगの操作は、ピボットिंगの基準としたいアイコンを「行」のエリアか「列」のエリアに移動する'. At the bottom, there are buttons for 'Clear', 'Preview IDs', 'Save', 'Create Report', and 'Cancel'.

Conc	%Inhibition
0.1uM	12%
1.0uM	67%
10uM	93%

Profile View デザイン画面

- 左側の項目リストからドラッグ & ドロップでデザインを作成
- リストに表示されるデータ項目はxmlのmapping file内で設定
- Designはデータベース中に保存
- Report TableはSARview設定に同期するため、SARviewの設定が変わると自動的に表示項目が変更
- Portlait / Landscapeでベースのフォームの大きさを設定

Library ID
Parent ID
Type
Status
Supplier
Chem. Abs. No.
Lab Notebook No.
Name
Originator
Handling Method
Hazard
Date Registered
Resp. Group
Literature Reference
Volume/Mass (Current)
Volume/Mass (Initial)
Volume/Mass (Unit)
Colour
BP (Lower)
BP Comment
MP (Lower)
MP Comment
Solubility
Solubility Unit
Solubility Comment
Radioactivity
Ractivity Unit
Salt Comment
SMILES Code
Physical State
Stability
Purity
Full Molecular Formula
Full Molecular Mass
Source Type
Purpose
Analysis
Composition
Drug Name
Container
Container ID
Date
Date Received
Purchase Order No.
Registrar
Registration Status
Free text

Report table
Database table
Portrait
Landscape

Compound ID: CH1026167-000
Batch Ref: CH1026167-000-003

Molecular Formula:
Molecular Mass:
BP (Upper):
MP (Upper):
Log P:

MDO Parameters
Purity: 100
AUC:
CL:
Solubility:
Stability: 4833.3
Lysa:
PAMPA:

DOPAMINE IC50(1)	DOPAMINE IC50 Curve	DOPAMINE r2	DEMO-CH TBU2-VTUCB IC50
113.294010	CHDR-0002:CH1026167-000 Pct Inhibition IC50 = 13.29	0.989	0.18

Study	Protocol	Test Occasion	Testset	Result	Result Value	Result Unit
DEMO-CH	TOPO-VITRO	REG1019-2		IC50	0.04	

Clear Save Apply Cancel
Data from Database (Abase+Oracle)

Statistics / Miscellaneous カラム

SARview では、検索結果のカラムを選択するだけでなく、AverageやSDを計算するカラムやコメント、日付などを入力するカラムを追加することも可能です。

検索結果の画面上で入力することが可能

AB-00000037		278.26	<input type="checkbox"/>		0.52	9.36	7.49
AB-00000038		278.35			1.50	3.98	2.88

Arithmetic Mean Max Mode Range Values
n Median Pop. SD SEM Variance
Geometric Mean Min Pop. Variance SD

Compound Proper... Chemical Properties Results Result Context **Statistics** Miscellaneous

Statistics カラム一覧

AB-00000038		278.35			1.50	3.98	2.88
-------------	--	--------	--	--	------	------	------

Comment Integer
Date Yes/No
Decimal

Compound Proper... Chemical Properties Results Result Context Statistics **Miscellaneous**

Miscellaneous カラム一覧

SARview01 - Report: 23 rows

File Edit View Bookmarks Query Data Tools Help

Query Database Results created or modified [] Clear

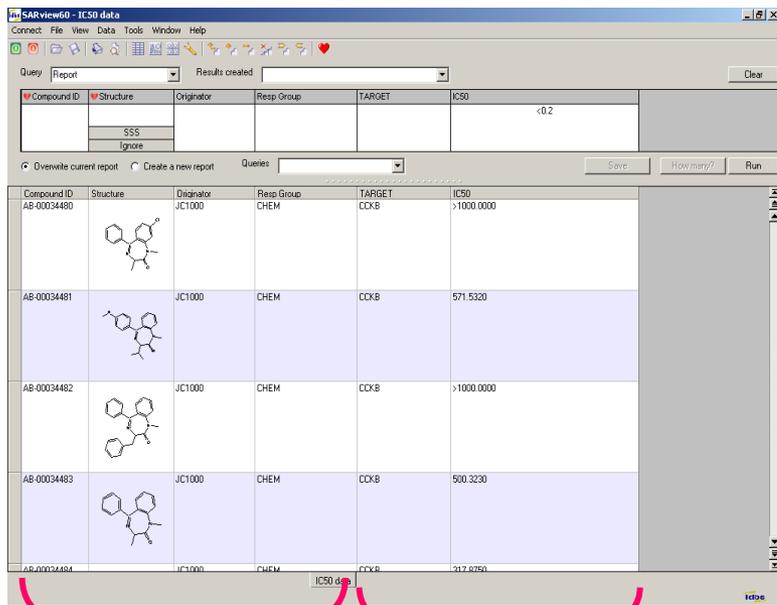
Compound ID	Structure	Molecular Mass	Yes/No	Comment	Date	IC50(1)	Max_Conc(1)	AUC(1)
AB-00000012		282.14	<input checked="" type="checkbox"/>	Comment 1	08/05/05	1.37	7.00	0.99
AB-00000021		296.32	<input checked="" type="checkbox"/>	Reason ABCDE	08/05/05	3.18	5.98	4.68
AB-00000022		385.32	<input checked="" type="checkbox"/>	Comment 2		0.83	4.87	2.71
AB-00000028		246.17	<input type="checkbox"/>			1.30	0.35	4.53
AB-00000032		488.57	<input type="checkbox"/>			3.38	0.75	8.00
AB-00000033		404.41	<input type="checkbox"/>			1.86	8.05	1.96
AB-00000036		214.04	<input type="checkbox"/>			2.48	3.24	5.68

Overwrite current report Create a new report Queries [] Save Run

Report

データソース

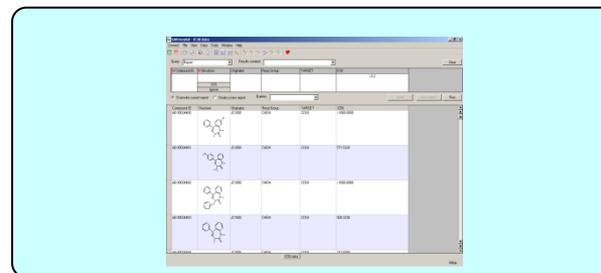
•データの検索元はActivityBaseのみならず、Oracleを使用した他の社内データベースともリンクが可能です。



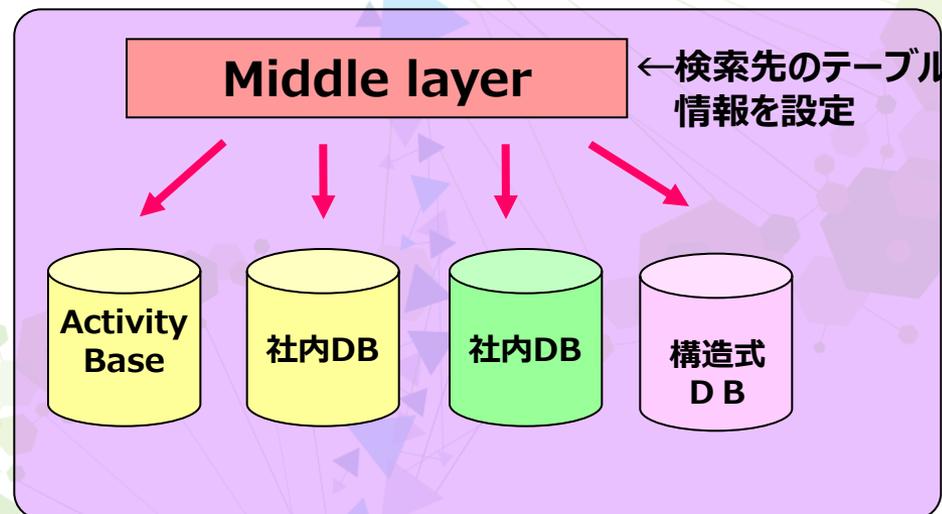
Compound ID	Structure	Originator	Resp Group	TARGET	IC50
AB-00034460	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)N2</chem>	JC1000	CHEM	CCK8	>1000.0000
AB-00034481	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)N2</chem>	JC1000	CHEM	CCK8	571.5320
AB-00034482	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)N2</chem>	JC1000	CHEM	CCK8	>1000.0000
AB-00034483	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)N2</chem>	JC1000	CHEM	CCK8	500.3230
AB-00034494	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)N2</chem>	JC1000	CHEM	CCK8	317.6750



Client



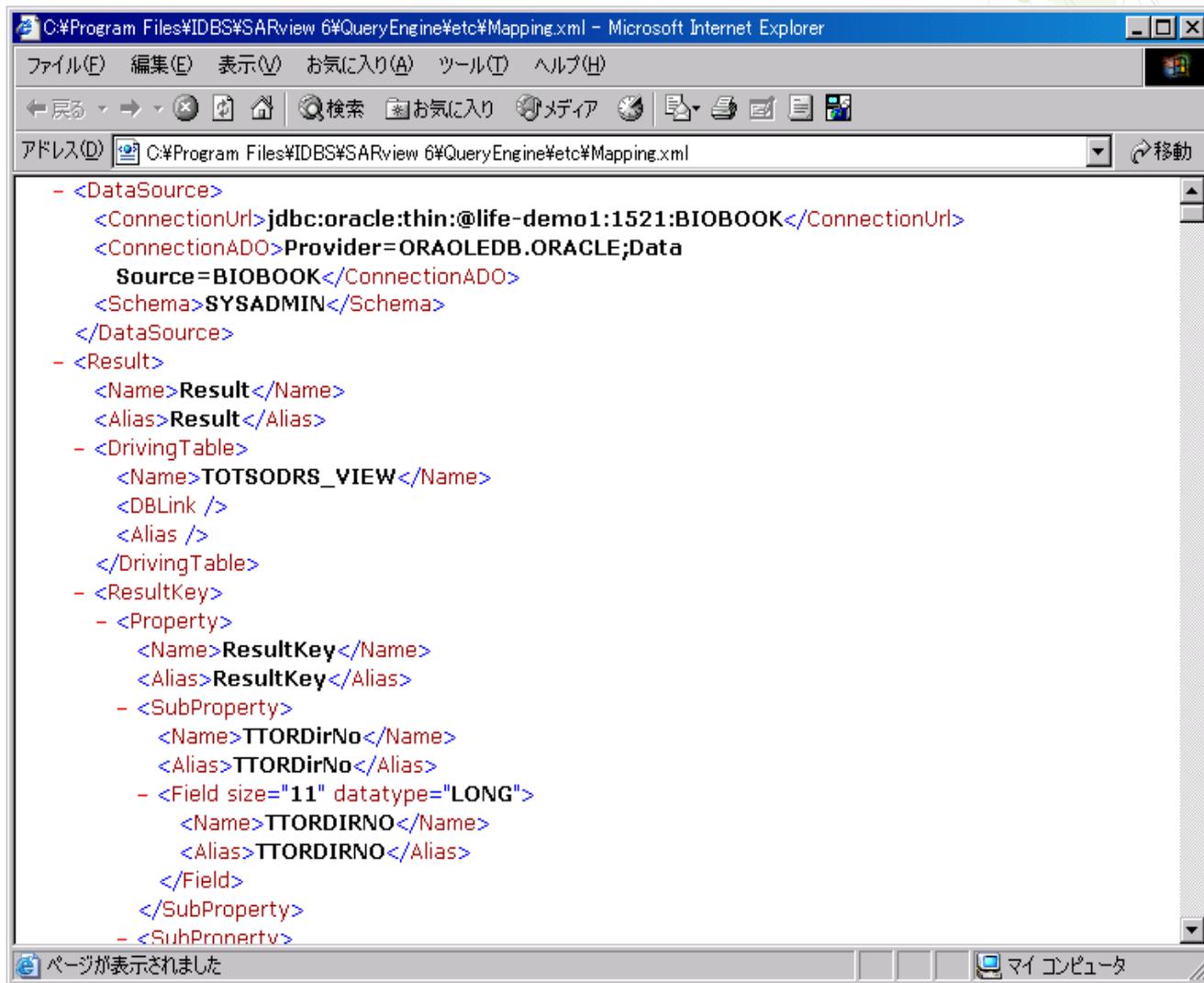
Server



データソース

【Mapping ファイル例】

データベースへ接続するための情報
やリンクするテーブルの情報をxml
形式で記述。



```
- <DataSource>
  <ConnectionUrl>jdbc:oracle:thin:@life-demo1:1521: BIOBOOK</ConnectionUrl>
  <ConnectionADO>Provider=ORAOLEDB.ORACLE;Data
    Source=BIOBOOK</ConnectionADO>
  <Schema>SYSADMIN</Schema>
</DataSource>
- <Result>
  <Name>Result</Name>
  <Alias>Result</Alias>
- <DrivingTable>
  <Name>TOTSODRS_VIEW</Name>
  <DBLink />
  <Alias />
</DrivingTable>
- <ResultKey>
- <Property>
  <Name>ResultKey</Name>
  <Alias>ResultKey</Alias>
- <SubProperty>
  <Name>TTORDirNo</Name>
  <Alias>TTORDirNo</Alias>
- <Field size="11" datatype="LONG">
  <Name>TTORDIRNO</Name>
  <Alias>TTORDIRNO</Alias>
</Field>
</SubProperty>
- <SubProperty>
```

本製品に関するご質問等は下記までご連絡下さい。

日本総代理店

The logo for CTC, consisting of the letters 'CTC' in a bold, blue, sans-serif font.

Challenging Tomorrow's Changes

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社

流通・エンタープライズ事業グループ
ライフサイエンス事業部
ライフサイエンス営業第2部

Tel:03-6417-6600

E-mail:ls-marcom@ctc-g.co.jp

〒141-8522 東京都品川区大崎1-2-2

アートビレッジ大崎セントラルタワー

<https://ls.ctc-g.co.jp/>

開発元

The logo for ID Business Solutions Ltd., featuring the lowercase letters 'idbs' in a blue, sans-serif font, with a yellow swoosh above and below the text.

ID Business Solutions Ltd.

<http://www.idbs.com/en/>