

DiscoveryStudio1.5 リリース！



DiscoveryStudio1.5は、新たにPipelinePilotベースで構築されたDiscoveryStudioプラットフォームにおける、最初のリリースプロダクトです。

DS Modeling 1.1, 1.2SBDの機能を統合し、Proteomics, X-Ray, そして Structure Based Drug designにフォーカスしたバージョンであり、Windows、Linux上で非常に使いやすい解析環境を提供します。

最高のアルゴリズムをより使いやすく

DiscoveryStudioは、PipelinePilotに採用されている技術を元まったく新しく設計されました。今後2年間あまりの期間において、アクセルリスはこの新しいプラットフォームにQuanta, InsightII, Cerius2, Catalystに搭載されている機能を移行していく予定です。

Windows, Linuxに対応したインターフェース

DiscoveryStudioはWindows、Linuxでまったく同じ操作環境を提供します。これによりユーザーは自分に適したOSを選択することが可能となります。

データ管理手法の変更

これまで用いられていたOracleベースのProjectKMIは、複数部門にわたる大規模な解析環境に向けて設計されていましたが、新しいDiscoveryStudioではより柔軟に利用できるファイルベースのデータ管理を採用しております。

より柔軟なアーキテクチャー

PipelinePilotをベースとするアーキテクチャーを採用することにより、将来は3rd party製のソフトウェア(ユーザーの自作、他社製品を含む)を柔軟に取り込むことが可能となります。またDiscoveryStudioのモジュール群はPipelinePilotのコンポーネントとしても提供されます。

最高のアルゴリズムおよびサポート

もちろん、DiscoveryStudioに搭載されているのは、これまで世界中の研究者に信頼されているアルゴリズムです。豊富な文献と適用事例がその妥当性を示しています。さらに、経験豊富なサポートサイエンティストと詳細なドキュメントが、初心者の方でも各ツールを正しく適用できるようお手伝いいたします。

豊富な解析モジュール群

DiscoveryStudio1.5には、以下のモジュール群が搭載されております。

➤ X-ray Components

CNX: 精密化計算、電子密度マップ計算、構造評価
HT-XPIPE: リガンド分子を含むデータ解析の自動化
X-BUILD: 分子モデルの構築

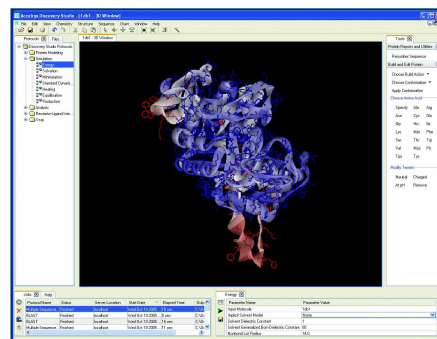
➤ Chemistry Components

Ludi: de novoのドラッグデザインツール
LigandFit: リガンド分子とのドッキングシミュレーション
LigandScore: ドッキング結果のスコアリングプログラム

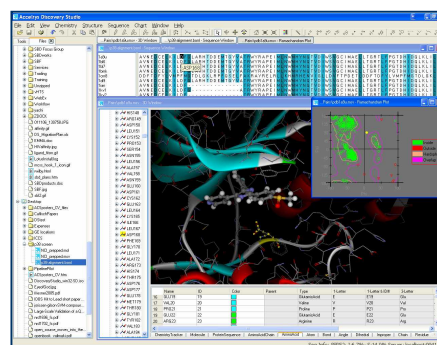
➤ Biology Components

Analysis: シミュレーション結果の可視化ツール
BioPolymer: ポリペプチドの構築、編集
CHARMm: 分子力学、動力学のシミュレーションエンジン
CHARMm Lite: 構造最適化に特化したCHARMm
MODELER: 自動ホモロジーモデリング
Protein Families: マルチプルアラインメント
Protein Health: Profiles-3Dを用いたタンパク質構造評価
Protein Similarity: 類似タンパク質の検索

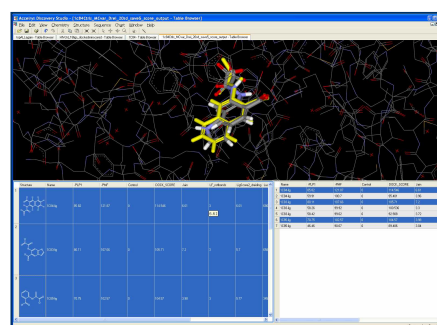
Delphi(静電荷および溶媒和計算)はBioPolymerに統合されました



▲ Discovery Studio 1.5のインターフェース。Windows版、Linux版で同じインターフェース、解析機能を利用可能。



▲ 3D view, Sequence window, Hierarchy window, Ramachandran plotを相互に関連付けながら参照可能。



▲ リガンドとのドッキングモードをテーブルと3D Windowで同時表示。

Great Science Faster...



アクセルリス株式会社
<http://www.accelrys.com>
Phone 03-3578-3860

お問合せは

ダイキン工業株式会社 電子システム事業部
<http://www.comtec.daikin.co.jp/SC/>
Phone 03-6716-0460(東京) / 06-6374-9315(大阪)



DiscoveryStudio1.5がサポートする研究領域

Protein Modeling

目的のタンパク質に対するアミノ酸配列が得られたら、これを用いて3次元の立体構造モデルを構築することが求められます。まずアミノ酸配列の相同性により、類似のタンパク質で立体構造既知のもの(X線あるいはNMRで決定されたもの)をPDB(Protein Data Bank)からPSI-BLAST等のアルゴリズムを用いて検索することからスタートします。これで得られたテンプレートタンパクの立体構造に対して、構造未知である目的タンパク質のアミノ酸配列をアラインメントし、3次元の立体構造モデルが作成されます(ここではMODELERが用いられます)。このアラインメントはPSI-BLASTやAlign123, Align2Dといったアルゴリズムを用いて行われます。こうして作成された立体構造モデルはProfiles-3Dのアルゴリズム等を用いて妥当性が検証され、さらなる解析のために用いられます(例えば、リガンド結合サイトの特定やインシリコミュタジェネシスなど)。

Simulations

タンパク質あるいはタンパク質複合体のエネルギー、ダイナミクス、静電プロパティの解析により、研究者は構造と機能の関係をより詳しく理解することができるようになります。CHARMMをAnalysisモジュール(トラジェクトリーファイルの解析)と組合わせて使用することにより、エネルギー計算や分子動力学シミュレーションを行い、安定構造の同定やコンフォメーション変化、そしてタンパク質およびタンパク質-リガンド複合体の時系列の特性変化を計算することができます。

Analysis

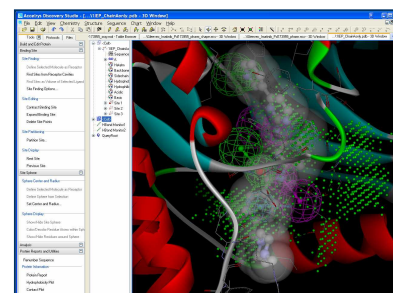
研究者はCHARMMのトラジェクトリーを解析し、さまざまな系のダイナミクスにおける溶媒環境の影響や静電的特性を調べることが可能となります。またBiopolymerモジュールにはDelphiと同様の静電ポテンシャル、溶媒和エネルギー計算機能が付加されています。さらに、リガンド結合サイト候補の位置を予測する機能も搭載されており、ドッキングや*de novo*のドラッグデザインに用いられます。

Receptor-Ligand Interactions

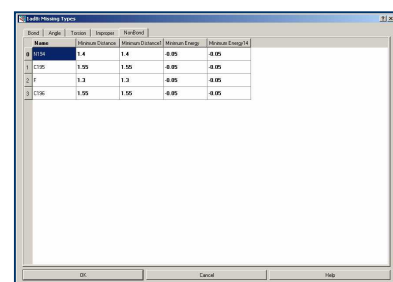
新規のリガンドに対してドッキングとスコアリングを行うことにより、リガンド分子との結合モードの候補を探すことができます。ドッキングを*in situ* minimization, scoringによって拡張することにより、化合物のライブラリに対してヒット候補であるかどうかバーチャルにスコアリングすることができます。また、リガンド化合物の部分構造(フラグメント)を生成、発見、最適化することにより、*de novo* (まったく新規の)ドラッグデザインを行うことも可能となります。

X-Ray

生体高分子のX線結晶構造学は、タンパク質およびタンパク質-リガンド結合物の重要な相互作用を可視化してくれます。Discovery Studio1.5に搭載されている結晶構造学のプログラムでは、例えばHT-XPIPEを用いることによりタンパク質-リガンド結合構造を水分子を含めた形で最適化するためのプロセスを自動化します。またX-BUILDでは対象とする構造の解析困難な部分について構造構築、最適化を行い、さらにCNXによって電子密度マップの生成、ordered solvent moleculeの同定、逆格子空間における最適化、そして構造の評価を行うことが可能となります。

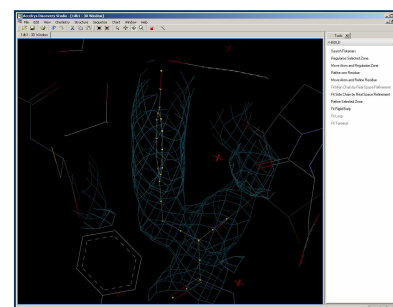


▲ 結合サイトの予測とファーマコフォアモデルのクエリー作成

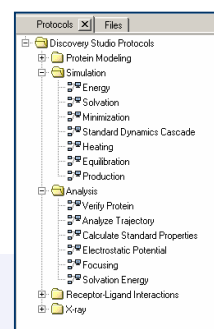


Atom	Charge	Hydrogen	Hydrophobic	Hydrophilic	Hydrophobic Energy	Hydrophilic Energy
1	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00

▲ Automated Typing engineの搭載により、力場をアサインできないアミノ残基、リガンドに対してパラメータを予測。



▲ ToolView PaletteからX-BUILDの機能を利用



▲ メニューから各種解析プロトコルを選択可能

サポートするプラットフォーム

* OS

Windows 2000 Professional SP 4, Windows XP Professional SP 1 or 2
RedHat Enterprise Linux WS 3.0 with updates 3 and 4, RedHat Enterprise Linux WS 4.0(LinuxはGNOMEデスクトップのみ)

* Graphics card

Nvidia Quadro FX 1100, FX1400, FX540, ATI V3200, 3D Labs Oxygen (Linuxのみ)

* 最小スペック

512MB RAM, 1GB HDDの空き領域, Pentium 4 または Intel compatible processor (クロックは2GHz以上), Windows on Intel x86 and EM64T, 32-bit support