

Discovery Studio の新しい技術とツール

新機能満載のDS2.0 ついにリリース！

- ・ Induced fit に対応したフレキシブル ドッキング
- ・ 抗体モデリングの精度向上
- ・ ファーマコフォア モデリングの機能向上
- ・ タンパク-タンパク ドッキング
- ・ 配列解析からモデリング シミュレーション、ドッキング、ファーマコフォア、QSAR、ライブラリデザインまでをカバー
- ・ 並列計算対応強化

Discovery Studio® は、生命科学研究者のための、最先端のモデリング・シミュレーション・ソフトウェアです。プロジェクトの創案からリード化合物の最適化まで、Discovery Studio には、エキスパートレベルの研究を可能にする、非常に優れたソフトウェア アプリケーションのさまざまなコレクションが組み込まれています。これらのコレクションはすべて、Linux または Windows ベースの使いやすいパッケージにまとめられています。Discovery Studio はアクセルリスの科学オペレーション プラットフォームである Pipeline Pilot™ 上に構築されているため、アクセルリス、社内開発者、その他のベンダーなど、誰が開発したのかに関係なく、必要なソフトウェアをすべて研究環境に統合して、本物のカスタム ソリューションを作成することができます。

Visualization

- ・ インタラクティブな3Dグラフを使用した、複雑なデータセットの表示
- ・ 3Dクリッピング面を使用して、簡単に主要特性を強調表示
- ・ 色指定で表面をマッピングし、特性を分類・同定
- ・ 劇的に向上した 3D データおよびファイルのインポート/エクスポート機能(最大5倍の速度に)
- ・ 3次元座標から求められる結合次数の知覚の向上
- ・ 糖質の化学構造の高速な構築

カスタマイズとスクリプト作成

- ・ Discovery Studio(DS)統合開発環境での容易なスクリプト作成と編集
- ・ あらゆる科学系関数のスクリプトへの統合
- ・ Perlスクリプトと機能拡張されたDSコンポーネントを使用した、ワークフローの自動化

Pipeline Pilot サポート

- ・ Protocols Explorer による、DS内での Pipeline Pilot(PP)プロトコルの直接管理
- ・ Pipeline Pilot プロトコルの PP クライアントや Webort への容易な展開
- ・ クラスタやマルチCPUマシンで効率のよい並列処理

配列解析

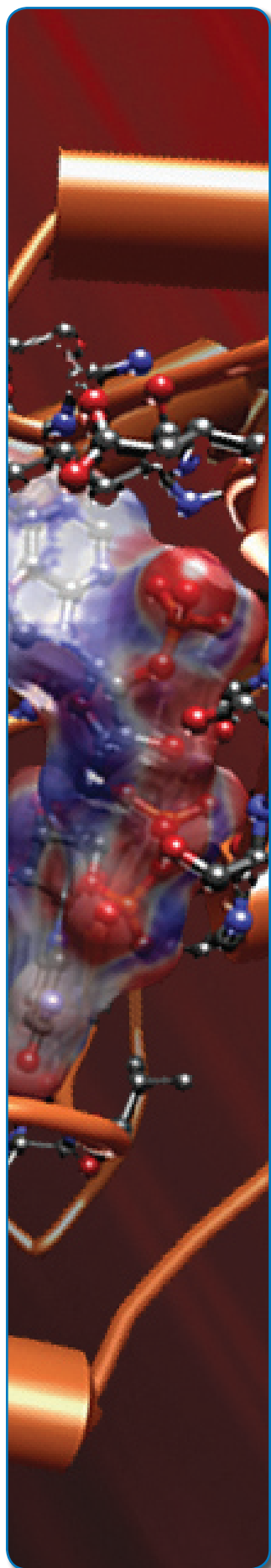
- ・ 多機能なアノテーション ビューアおよびエディタの利用による配列解析
- ・ 核酸の翻訳からのアミノ酸配列の直接生成

タンパク質モデリング

- ・ 最も高速で正確なドッキング アルゴリズムの ZDOCK と RDOCK を使用した、タンパク質-タンパク質ドッキングの実行
- ・ 抗体ループホモログの同定と3D構造の自動構築
- ・ 改良された分析ツールによるBLASTの結果の確認(SCOP ID、リガンドID、X線分解能など)
- ・ アルゴリズム MODELER および LOOPER の最新拡張バージョンの使用
- ・ アライメント ポジションの一部を固定したまま、解析が可能

ファーマコフォア分析

- ・ 副作用の可能性や共同開発のターゲットを把握するための、何百ものファーマコフォアモデルに対するリガンドのスクリーニング
- ・ フラグメント ベース設計を使用したファーマコフォアからの新しい化合物の作成
- ・ リガンドおよびタンパク質の構造情報の統合による、ファーマコフォア モデルの構築



- ・ 直観的なグラフィック インタフェースの使用による独自のファーマコフォア機能の作成と、高度なCatalyst機能に対するシンプルなSMARTSベースのファーマコフォア機能の拡張
- ・ サブサイト別ファーマコフォア仮説のクラスタ化による交互結合様式の同定
- ・ ファーマコフォア モデルへのオプション機能の追加による高度な検索コントロール

QSARとライブラリ設計

- ・ 形状ベース記述子の使用による、特定の結合部位の検索設定と QSAR 分析の補助
- ・ DMOL および VAMP での高度な半経験的量子力学ベース記述子の使用。
GFA (Genetic Functional Approximation) と Neural Network メソッドの使用による、複合体データからのモデルの構築。
- ・ 主成分分析、重回帰、ベジアンモデル、PLS (partial least squares) などのモデリング技術の使用による、記述子データの把握とライブラリの作成
- ・ カスタム ライブラリ設計ツールによる、複数の化学ライブラリの優先順位付けと特定のライブラリ メンバの選択

Structure Based Design

- ・ LibDockによる、何千ものリガンドの受容体のホットスポット (極性および無極性イメージ) への高速ドッキング
- ・ 結合時の受容体のフレキシビリティを考慮したことで、仮想ハイスループット スクリーニングの精度が向上: LibDockの高速な結合能力とChiRotor (CHARMm) の正確な受容体のサンプリングの組み合わせによって可能に。
- ・ ハイスループット モードでのタンパク質-リガンドの相互作用の分析
- ・ 重要な結合ポケット特性のグラフィカルな分析による、リード化合物の最適化の促進
- ・ 大量の低分子化合物ドッキングポーズの迅速な分析による、結合モードのクラスタ化および比較
- ・ X線結晶構造/ドッキングポーズの分析による、類似性と多様性の確認
- ・ 結合モード/相互作用パターンに基づいたフィルタリングによる、関連ポーズの高速検索

- ・ すべての構造の重ね合わせと結合部位領域への集中による、同一受容体に対する複数の結晶形および/またはコンフォメーションの分析
- ・ タンパク質-リガンド相互作用の配列へのマッピング、および受容体配列セットの分析による、配列-活性関係パターンの同定

シミュレーション

- ・ 標準モード (最小システム) または準調和モード (MDトラジェクトリ) の分子システムでの振動、回転、および翻訳エントロピーの計算
- ・ エントロピー エネルギー条件の追加による、DS CHARMm ベースの MM-PBSA または MM-GBSA の計算精度の向上
- ・ CHARMmのGeneralized Born法を使用した、特定の残基の滴定曲線および予測解離指数の作成によるタンパク質-リガンド、またはタンパク質-タンパク質ドッキング、結合エネルギー、タンパク質安定性の計算精度の向上
- ・ 予測解離指数に基づいた、指定された pH での残基別プロトン化状態の自動設定
- ・ 高精度MMFF力場を使用した、タンパク質およびタンパク質-リガンド複合体のシミュレーション
- ・ 2次元のエネルギー補正表面のあらゆる2面角への適用が可能な、2面クロスタームのエネルギー補正マップの使用による、MDトラジェクトリの安定性の向上

分析

直観的で簡単な操作でMDトラジェクトリを分析

- ・ 回転運動の半径 (RGYR: Radius of gyration)
- ・ デンドログラムのプロットからクラスタの選択が可能な、軌道のクラスタ化
- ・ 軌道に沿った主成分分析 (PCA: Principle Component Analysis)
- ・ Phi-Psi Time シリーズ
- ・ 動径分布関数