

FlexSIS、FTreesのMOEインターフェース更新

BioSolveIT社のFlexSISとFTreesは単体でも解析が可能ですが、MOEをお持ちの方は系の準備や計算条件の設定、結果の解析をMOEのインターフェース (I/F) を介してより簡単に行うことが可能です。今回これらのI/Fを更新することにより、ベースとなる基本機能 (ドッキングシミュレーションと類似構造検索) の他にも、様々なオプションモジュールがMOEから実行できるようになりました。この新しいMOE I/Fと、先日リリースされたFlexSIS 3.0とFtrees 2.0の新機能について紹介します。

FlexSIS I/F

MOEに搭載されているI/Fは、今までベースとなるFlexSISとファーマコフォアフィルタを行うFlexSIS-Pharmにのみ対応していました。今回、その他のオプションモジュールであるFlexSIS^cとFlexSIS-Ensemble、FlexSIS-Screenに対応しました。

FlexSIS^cは、受容体ポケット中でリガンド構造をコンビケム合成するモジュールです。MOEで用意した母核、置換基DBを入力ファイルとして利用できますのでMOE Clip-R機能 → FlexSIS^cという流れで、ファイルの準備と計算が可能です (図1)。

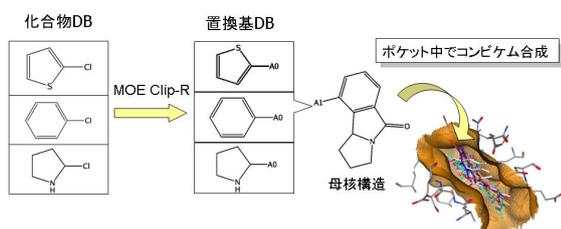


図1 FlexSIS^c I/Fを利用した解析の流れ

FlexSIS-Ensembleは、リガンドと受容体とのInduced Fitを行います。側鎖構造の異なる複数の受容体構造 (PDBファイル) を入力として、ポケット構造とそれに結合したリガンド構造を出力します。

FlexSIS-Screenは、精度を保持したままFlexSISの計算を高速化させるためのモジュールです。設定パネルから、受容体から予測される相互作用点のクラスタリングや、ベースフラグメントの配置数などを指定することで、計算コストを軽減することができます。

FTrees I/F

I/Fを利用することで、MOEウィンドウ中の分子をクエリとして、化合物ライブラリに対してフェジー類似構造検索を行うことができます。

新しいI/F (図2) では、以下の機能が追加されました。

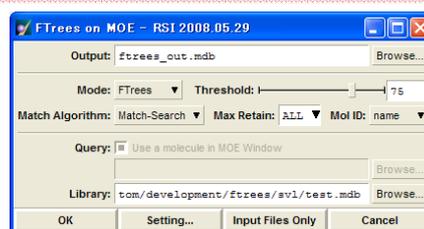


図2 FTrees I/F

- ・入力ファイルとしてMDBファイルをサポート
- ・出力させる分子の類似度の下限値の設定
- ・出力分子数の設定
- ・計算に使用するスクリプトファイルの作成

FTreesの結果として、類似度と化合物構造が出力されます。また、このI/FからオプションモジュールであるFTreesFSも実行可能になりました。

FlexSIS、FTrees

新バージョンリリース

FlexSIS 3.0とFtrees 2.0をリリースしました。

FlexSIS 3.0では独自のグラフィカルユーザーインターフェース (GUI) が搭載され、MOEをお持ちでない方でも簡単に系の準備や計算を実行できるようになりました (図3)。

FTrees 2.0には、ウィザードコマンドが追加され、FTreesが問い合わせる順にファイルやオプションを指定することで計算を実行できます。また入力ファイルとしてSDファイルやSMILESをサポートし、新規検索アルゴリズムも追加されました。

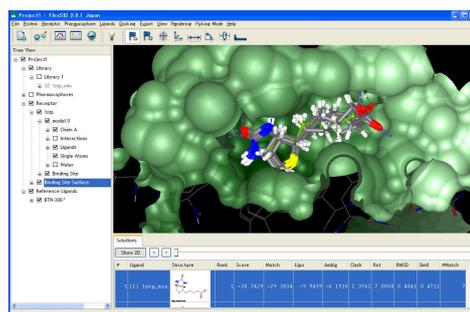


図3 FlexSIS 3.0 GUI