



BioSolveIT KNIME Extensionsリリース

BioSolveIT社創薬支援ツールのKNIME®用Extensionsがリリースされました。創薬支援ツールは、分子をフラグメント単位で取り扱い、低分子のドッキングや重ね合わせ、デノボデザインを行うユニークな分子設計ツールです。これらのノードは単独でも使用できますが、本誌10ページのMOE Extensionsや他のノードと組み合わせて使用することも可能です。ここでは、BioSolveIT Extensionsの特徴について紹介します。

■解析ノード

以下のノードが提供されます。いずれのノードもSSH経由で他の計算サーバにインストールされているFlexSIS、FTrees、FlexSを使って処理を実行することができます。

■FlexSISノード

ドッキングシミュレーションを行うノードです。FlexSISは分子をフラグメント単位に分けてドッキングを行います。受容体-フラグメント間に一対でも相互作用対が存在すれば探索領域になるので相互作用対が少ない系にも適用できます。

■FTreesノード

類似構造検索を行うノードです。従来のフィンガープリントを使用する方法ではなく、化合物を化学的な特性が繋がった木構造に変換し検索に使用します。化合物の3次元配座に影響されない、クエリ分子のトポロジーを保存した構造を検索できます。FTreesによる2次元または3次元重ね合わせを確認することができます。

■FTreesFSノード

デノボデザインを行うノードです。クエリ分子の類似構造を分子フラグメントをつなげることで構築します。

■FlexSノード

分子アラインメントを行うノードです。高速に分子の重ね合わせを行うことができ、テンプレート化合物と60分子の重ね合わせを数分で行うことができます。

■Naomi Converterノード

分子ファイルの変換を行うノードです。SDF、SMILES、MOL2の相互変換と画像ファイルへの変換が可能です。MW、logPなどの物性値で分子フィルタリングを行うこともできます。

■BioSolveIT Tableノード

出力データをテーブル表示するためのノードです。データのソートやフィルタリング、表示形式の変更など多彩な機能があります。

■BioSolveIT Viewerノード

分子構造を表示するためのノードです。低分子以外にもタンパク質の表示にも対応しています。分子アラインメントやドッキングの結果の観察に利用できます。

■ワークフロー例

FlexSとFTrees、FTreeFSを使ったワークフロー例は以下の通りです。

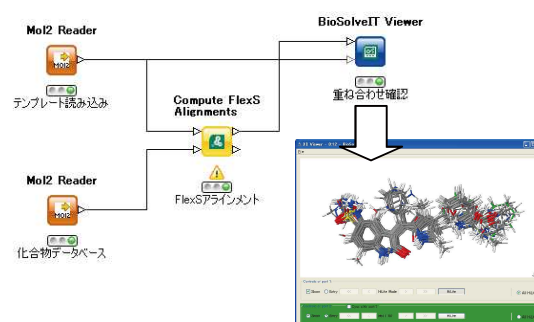


図1: 分子アラインメント

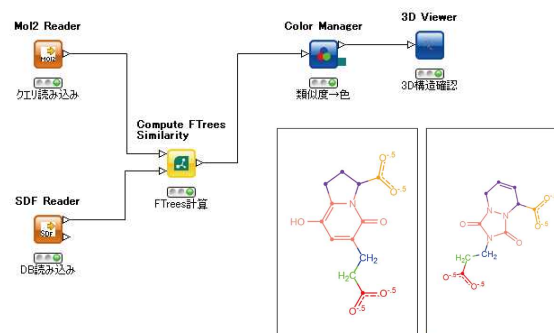


図2: 類似構造検索

左:クエリ分子, 右: 類似分子(FTreesによる類似度0.87)

FTreesで使用する類似の官能基を同色で確認可能

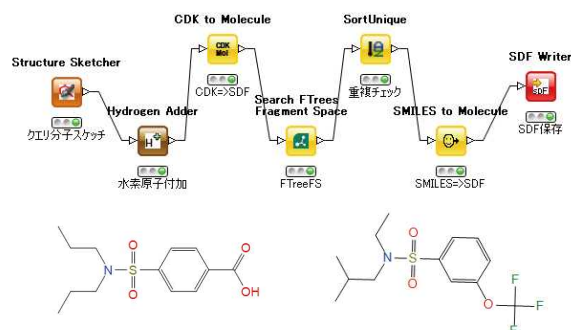


図3: リガンド構造に基づくデノボデザイン

左:クエリ分子, 右: 出力分子(FTreesによる類似度0.98)

■ご請求について

各ツールの保守契約締結中の方で、BioSolveIT KNIME Extensionsをご希望の方は、弊社サポートリクエスト窓口(support@rsi.co.jp)までご連絡ください。

* <http://www.knime.org/>