



SOAP技術によるMOEからFTreesとPoseViewの利用

BioSolveIT社は、様々なユニークかつ強力な創薬支援ツールを開発しています。それらのツールの内、類似構造検索やリガンド設計を行うFTreesやリガンド-受容体間相互作用図を作成するPoseViewは、合成研究者にとって有用なソフトウェアです。各ソフトウェアは、各利用者のマシンにインストールして使うのが一般的ですが、SOAP技術と組み合わせることで、計算サーバーだけにソフトウェアをインストールして利用することが可能です。弊社ではSOAP技術を使ってMOEからシームレスにFTreesとPoseViewの解析を行うインターフェースを開発しました。ここではそのインターフェースの概要を紹介します。

■BioSolveIT社のFTreesとPoseView

FTreesは、化合物の官能基特徴とそのつながりを保存した構造を検索することができ、化学者が直感的に類似していると考えられる構造を高速に見出すことができるソフトウェアです。

PoseViewは、リガンド-受容体複合体構造を入力して原子レベルで分子間相互作用の2D図を作成するためのソフトウェアです。

■MOE/web SOAP技術の活用

MOE/web SOAPサービスはSOAPサーバーがクライアントマシン上のMOEからデータを受け取り、SOAPサーバー上に搭載されたサードパーティーのプログラムで計算を行った後、計算した結果をクライアントマシンに戻します(図1)。MOEのSVLプログラムによって制御でき、SOAPで提供されるサービスがあたかもMOEの機能の一部であるかのように使用することが可能になります。

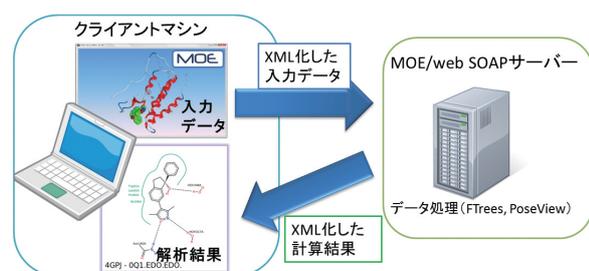


図1 SOAPサーバーとクライアントマシンとの通信

■FTrees SOAPインターフェース

MOEに読み込まれた化合物の構造をもとに次のような3種類の利用方法があります。

① 化合物のデータベースに対する類似構造検索

MOE上の化合物をクエリーとしてサーバー上のデータベースに対して構造類似度を計算し、データベース中にある類似化合物を提示します(図2)。

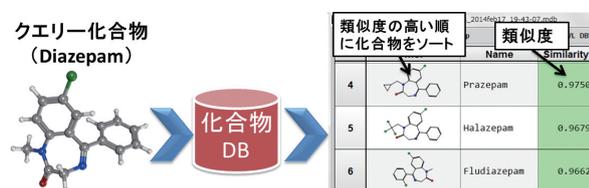


図2 SOAPインターフェース/FTreesの入出力

② 2D Mapping

2つの化合物の官能基ごとの類似度を表示します(図3)。

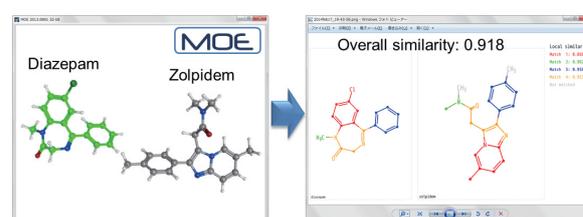


図3 SOAPインターフェース/2D Mappingの入出力

③ FTrees-FS

フラグメントスペースから*de novo*リガンド設計をします。

■PoseView SOAPインターフェース

MOEに読み込まれた複合体構造をもとにPoseViewを用いてリガンド-受容体間相互作用図を描画します。注目する残基とその周辺残基との相互作用の作図も可能です(図4)。

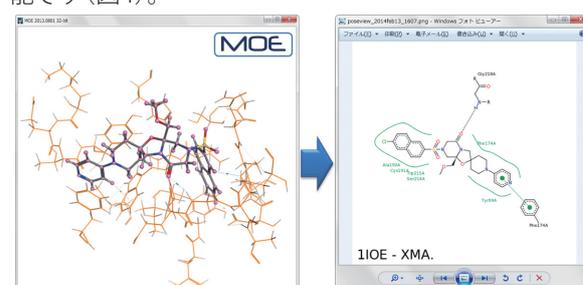


図4 SOAPインターフェース/PoseViewの入出力

■まとめ

SOAPインターフェースを用いることで各利用者のマシンにFTreesやPoseViewをインストールしなくても、各マシンのMOEからそれらの計算が実行できるようになります。FTreesの類似構造検索や2D Mapping、*de novo*リガンド設計の結果は、新規合成の指針を立てる上で役立ちます。この解析結果はMOEのデータベース形式で得られるため、すぐにMOEでの解析に利用することができます。PoseViewの結果は、複合体の相互作用を理解する上で役立ちます。このインターフェースによって、合成研究者に有用なソフトウェアであるFTreesやPoseViewの利用が容易になり、研究開発の効率化が期待できます。