

情報化学システム構築ツール

Daylightツールキット 販売開始

本年4月より販売を開始しましたDaylight CIS社製Daylight ツールキットは、創薬研究支援のための強力なシステム構築ツール群です。お客様のニーズに併せた柔軟で高速な化合物情報処理システムを構築できます。今回はDaylightツールキットの概要とインターフェースカスタマイズについて紹介します。

◆ Daylight ツールキット

Daylight製品はいわゆるパッケージソフトではなく、一連のツールキットで構成されています。それぞれのツールキットはDaylight CIS創立者のDr. Weiningerが考案した分子表記法であるSMILESや、SMILESを検索用に拡張したSMARTSなどを基盤としています。このツールキットを組み合わせた既存のシステムとの連携や、独自の化合物登録・探索システムの構築など、高性能な研究支援システムを柔軟に構築できます。すでに海外では300社以上の製薬会社・バイオベンチャーでの導入実績があり、システム基盤構築ツールとしての性能が高く評価されています。

● Merlinシステム

Daylightツールキットで構築するデータベースシステムの一つに、Merlinシステムがあります。そのユニークな特長として、Merlinシステムではデータをディスクではなく、全てメモリ上で保持します。およそ100万件の分子物性情報であれば100 MBのメモリに格納できますので、大変高速に動作し、データベース全体に対する高速なマイニングが可能になります。

豊富なデータをいろいろな角度から眺めることで、小さな発見が新たなひらめきを、さらに別の発見へと触発します。今までの研究環境では考え付か

なかったような知見が得られるかもしれません。

その他、物性計算やCGIのためのツールキットなども用意されています。

◆ Daylight インターフェースのカスタマイズ

Daylightツールキットは用途に合わせて柔軟にカスタマイズできますので、他のアプリケーションと連携させることも可能です。普段使用しているアプリケーションから強力なDaylightツールキットを簡単に利用することができます。

例えば、Daylight社製品にはX-Window用のMerlinインターフェース(図1)が用意されていますが、CCG社製MOEをカスタマイズしてMerlinインターフェースとして使用することもできます(図2)。このGUIにより、Daylightデータベースへの化合物探索をMOEの通常の操作と同じように行うことができます。さらに、この探索結果を利用してMOEでの解析を続けることも可能です。

また、InforSense社製KDEではOracleカートリッジであるDayCartを活用するためのノードが用意されています。

Daylightツールキットにより、従来のパッケージ

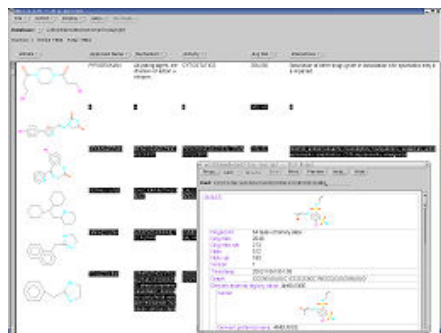


図 1 X-Window用Merlinインターフェース

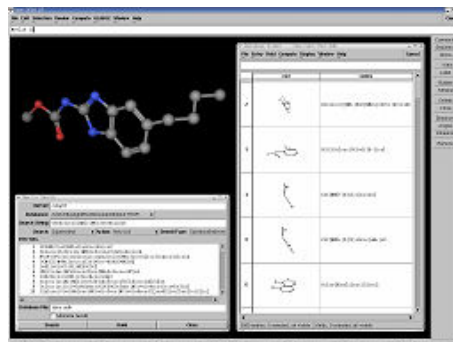


図 2 MOE用Merlinインターフェース