

Daylight 新バージョンリリースと活用事例のご紹介

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。お客様のニーズに合わせて、高速な化合物情報処理システムを柔軟に構築できます。今回は新バージョンの概要とDaylight製品の活用事例を紹介します。

Daylight v4.92 リリース

本年5月末に新バージョンであるDaylight v4.92がリリースされました。Toolkitのバグ修正に加えて、以下のような新機能の追加や機能改善が行われています。

◆新規Convertプログラム

- ・ REACTION conversion (rd2smi, smi2rd)

rd2smiはRDファイルをReaction SMILES形式に変換するプログラムです。逆に、smi2rdによりReaction SMILESをRDファイルに変換することもできます。反応式データの登録や解析が効率よく行えます。

- ・ QUERY conversion (sd2smarts, rd2smarts)

SDファイルやRDファイルをSMARTS形式 (SMiles ARbitrary Target Specification) に変換するプログラムです。MDL形式のSD/RDファイルに収納されているクエリデータをコンパクトな形式に圧縮して使用できます。

◆Convertプログラムの改善

既存のConvertプログラム (mol2smi, smi2mol) については分子認識能力が強化されています。以前のバージョンではE/Z異性を強制的に割り当ててしまう例もあったのですが、そのようなあいまいな分子構造も認識できるようになりました。

Daylight社にて総計100万件の化合物データを用いて新バージョンの動作検証を行った結果、SD形式では99.994%、RD形式では99.46%の精度が得られたと報告されています。動作検証作業では、SMILES → SD/RD → SMILESの分子フォーマット変換により、元のSMILESデータが正確に再現されるか確認しています。

◆フローティングライセンス管理

新バージョンでは、新規ライセンス形態としてフローティングライセンスが追加されました。ライセンス管理には FLEXnet が使用されており、Daylight toolkit / プログラム / DBサーバが管理

できます。ライセンス登録が簡便になり、より多くのマシンで導入しやすくなりますので、自作ツールや既存プログラム活用の幅が広がります。

なお、今回のバージョンアップではTDTフォーマット (THOR Data Tree : THOR データベースで使用されるフォーマット) には変更が加えられていません。このため、v4.7以降であれば、新バージョンへ移行後も既存のデータベースを引き続き使用できます。

この他、MCL・クラスタリングツール・CLogPツールやDayCart (DaylightのOracle Cartridge) にも機能追加・改善が行われています。

Daylightツール活用事例 (ChemBank)

Daylightツールキットを活用して、大量の化合物データを管理しているChemBankというWebページが公開されています。以下のURLから、構造検索・類似性検索や記述子フィルタリングをお試し頂けます (図1)。ChemBankはNCIのInitiative for Chemical Genetics (ICG) の協力によりBroad Institute (Harvard大・MIT共同施設) で作成されています。

ChemBank :

<http://chembank.broad.harvard.edu/>

Molecule	Descriptor	Value
ChemBankID: 1015750	Molecular Weight	8312648
	Rotatable Bonds	0
	HBond Acceptors	1
	HBond Donors	0
	LogP by GhoseCrippen	1.165
Tanimoto score	1	
ChemBankID: 1030434	Molecular Weight	10715306
	Rotatable Bonds	0
	HBond Acceptors	1
	HBond Donors	0
	LogP by GhoseCrippen	1.851
Tanimoto score	.86875	

図1 ChemBankでDaylight社の提供する類似性検索機能を実施した例