

Daylight 新バージョンリリース

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を紹介します。

Daylight v4.93 リリース

本年5月末に新バージョンであるDaylight v4.93がリリースされました。ツールキットやアプリケーションツールのバグ修正に加えて、以下のような新機能や新プログラムが追加されています。

◆Webサービスプログラム

Webアプリケーションを迅速に開発するためのWebサービスプログラムが新製品として追加されました。化合物情報の処理ツールをインターネット・イントラネットを利用して迅速に共有できるようになります。

このサービスを利用するためのインターフェースはWSDL (Web Service Description Language)を利用して自動生成させることができますので、既存のツールとの連携も容易になります。新バージョンでは分子構造の正規化や物性の計算などのWebサービスが用意されています。

◆共通部分構造の抽出とクラスタリング

共通部分構造を抽出する関数がSMARTSツールキットに追加されました。入力した複数の化合物の中で共通している結合パスを共通部分構造として抽出することができます。

さらに、この機能を利用した `sdcluster` (Scaffold-Directed Cluster) というクラスタツールも用意されています。従来のクラスタツールでは分割型のクラスタリングを行いますが、この `sdcluster` では部分構造が共通するエントリ同士を結合してクラスタを形成する凝集型クラスタリングが可能になります。エントリを結合する毎に共通部分構造は徐々に小さくなりますが、エントリ数が指定した閾値を超えた時点でクラスタとして確定し、母核が抽出されます。

例えば、入力したSMILESのリスト (図1) に対して、共通部分構造として母核を抽出できます。

◆smi2gifの強調表示

指定したSMARTSを強調して表示する機能が `smi2gif` プログラムに追加されました。SMARTS

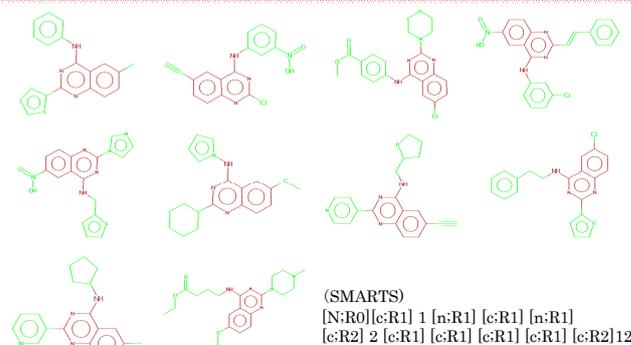


図1 `sdcluster`を利用した母核の抽出

検索により得られた分子構造をCGIなどを利用して画像表示する場合に、該当する部分構造を簡単に確認できるようになります。

◆オブジェクト指向ラッパー

ツールキットを使用してオブジェクト指向プログラミングを行うためのラッパーツールキットが開発されました。オブジェクト指向を取り入れることで、原子・結合・分子などの構成要素に関連する情報とその操作を一体化して扱えますので、見通しの良いプログラムを作成しやすくなります。ラッパーはC++とJavaに対応しています。

◆マルチスレッド化ツールキット

ツールキットがマルチスレッド化に対応しました。同一の分子情報を複数のスレッドで共有できるため、スレッド毎に同じ分子オブジェクトを逐一作成する必要がなくなります。このため、メモリ消費量の削減や処理の高速化が期待できます。複数のスレッドからのアクセスを制御するための関数も用意されています。

また、DayCartでもマルチスレッドを活用できるようになりますので、検索をさらに高速に行えるようになります。

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、v4.7x以降のバージョンからであれば新バージョンへの移行後も既存のデータベースを引き続き使用できます。