

Daylight -新バージョンと母核クラスタリングツール-

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弊社で開発したMOE版母核クラスタリングツールをご紹介します。

Daylight v4.94 リリース

本年2月に新バージョンであるDaylight v4.94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が追加されています。

◆Webサービスプログラムの新機能

前バージョンから製品ラインナップに追加されたWebサービスプログラムに以下の新機能が搭載されました。組織内での共有が容易なWebアプリケーションを利用して、より多彩な化合物処理を行うことが可能になります。

- getClogP

分子のCLogP値を出力する機能です。

- getTautomers

分子の互変異性体を出力する機能です。

- normalizeSmiles

指定の規則により分子を正規化する機能です。

- desaltSmiles

塩や溶媒となる部分構造を除去する機能です。

- generateRTable

入力した分子を、指定した母核によって複数のフラグメントに分割し、図1のように母核以外の部分をR-groupとして出力する機能です。また、複数の母核を認識することが可能です。

◆smi2gifのPNG表示

SMILESに対応する化合物を描画するCGIツールsmi2gifにPNG形式で描画するオプションが追加されました。PNG表示の際にはアンチエイリアス

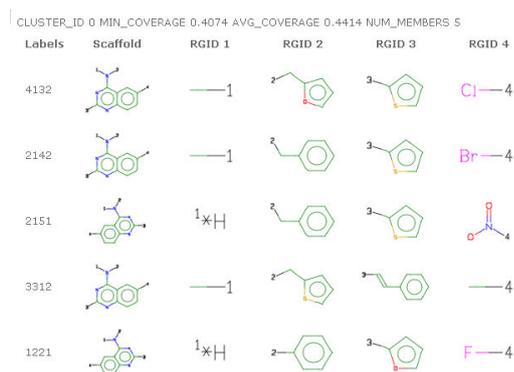


図1 母核構造とRグループへの分解

処理と線幅の調整が施されますので、GIF表示に比べて滑らかに表示されます。

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、新バージョンへの移行後もv4.7以降のバージョンのデータベースに登録されているデータを引き続き使用できます。

また、今回のリリースには含まれていませんが、Merlin (Daylight製データベース) を使用して高速な化合物検索を手軽に行えるWebインタフェースの開発も進められています。

母核クラスタリングツール

SMARTSツールキットを利用して化合物クラスタを作成するツールを、弊社で販売しているCCG社のMOEを利用して開発しました。化合物エンタリに対する共通部分構造の抽出を繰り返しながら、図2のように母核によるクラスタを生成します。

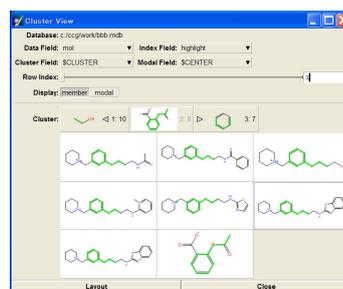


図2 生成された母核クラスタ

同様の処理機能はすでにDaylight製品の一つであるsdclusterプログラムに搭載されていますが、このプログラムは現在Linux版のみの提供となっています。それに対して、MOEを利用した母核クラスタリングツールの場合はツールキットを利用して開発されているため、Linuxに限らずWindowsなどの様々なOSで実施可能になります。

このツールは、MOEで提供している他のクラスタリングツールと同様にMOEのデータベースファイルに対して操作します。クラスタ処理が終了すると、クラスタの識別子の情報として母核に対応するDaylight純正のSMARTS文字列を出力します。