

Daylight -化合物探索ツール Mesmir (ベータ版)-

Daylight社製品は、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、多機能で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、Daylight社にて現在開発中の化合物探索ツールMesmirを紹介します。

化合物探索ツール Mesmir

現在開発中のMesmirは、Daylight社が提供する構造検索エンジンMerlinの機能をWebブラウザから利用するためのツールです。従来から提供しているMerlinクライアントはX-Window用のツールであるため、UNIX系OSのみで使用可能という制限がありました。これに対して、Webブラウザから使用するMesmir (図1) は、MS-WindowsなどのOSでも使用可能になりますので、データベース(DB)活用の幅が広がります。

◆既存DBの活用

既存DBの活用もMesmirの大きな特長です。従来のMerlinエンジンでは、利用するデータがTHORサーバにあらかじめ登録されている必要がありました。機能の改良によりTHORサーバ外にあるデータも直接取り込むことが可能になりました。このため、THOR/Merlin専用のDB環境を新規に構築しなくても社内で構築しているDBや化合物カタログなど、既存のデータ資源を有効に活用してMesmirインターフェースからDaylight社の高速な構造検索を実施できます。

#	SMILES	similar	isomer	AsinEx ID
1	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似度フィルタ	類似	BAS 0018663
2	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	検索設定...	非濃	BAS 0139546
3	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	印刷/書き出し	類似	BAS 1058800
4	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	表示/非表示	類似	BAS 0608599
5	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似	類似	BAS 0159078
6	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似	類似	BAS 0554397
7	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似	類似	BAS 0600286
8	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似	類似	BAS 0255807
9	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似	類似	BAS 0338895
10	<chem>O=C1NC(=O)C=C1</chem>	類似	類似	BAS 0080172

図1 開発中のMesmirインターフェース

◆最新のWeb環境

Mesmirは最新のWeb技術を積極的に利用しています。現在は開発中のため、ヒットリスト(検索結果)のテーブル表示画面のみ用意されています。

が、見やすく鮮やかな画面レイアウトやスクロールバーによる切れ目ないテーブルスクロールなど快適なアクセス環境を提供しています。

◆化合物へすばやくアクセス

Mesmirを利用すると目的の化合物にすばやくアクセスできます。検索条件があいまいで化合物を特定しづらい場合でも、簡単なクエリから開始して探索的(芋づる式)にヒットリストを作成できます。ヒットリストの内容を確認しながら、検索結果自体をフィルタ条件として検索したり、クエリを追加するなどの微調整が可能です。また、作成途中のヒットリストを一時的に保持しておき、複数のヒットリスト同士での演算処理もできますので、和集合や差分などの複雑な演算にも対応できます。このように、Merlinエンジンの高速・高度な検索機能により検索の試行錯誤が容易になりますので、検索する前に検索条件を明確にしておく必要もなくなります。意のままにいつでも気軽に検索できる快適なDB環境が得られます。

◆独自カスタマイズ

MesmirではHTML形式で情報をやり取りするので、独自機能の組み込みなどの表示ページのカスタマイズも行いやすくなります。Mesmirのページと社内で使用するWebポータルやイントラネットのページの間で相互にリンクを用意することで普段ご利用のツールと組み合わせで使用できます。

Daylight版 JMEアプレット

Mesmirで標準的な描画ツールとして搭載されているJMEにもDaylight社が独自に拡張を施しています。SMARTSの原子/結合属性を詳細に指定したり、頻繁に使用する部分構造のテンプレート登録により簡易入力することが可能になりました。

JMEに限らずISISDrawやChemDrawなどのプラグインも描画ツールとして利用できます。このため、慣れ親しんだ描画ツールを活用しつつ、検索機能の部分のみDaylightツールの高速/柔軟な構造検索へと拡張することも可能です。