

Daylight製品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。お客様のニーズに併せて、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について紹介します。

■Daylight v4.95 リリース

昨年10月に新バージョンである Daylight v4.95がリリースされました。以下のような変更、新機能の追加やツールキット・アプリケーションツールのバグ修正が実施されています。

■PostgreSQL版DayCart

これまでOracleデータベース (DB) のカートリッジとして提供されていたDayCartが、今回のバージョンから PostgreSQL DBでも使用可能になりました。PostgreSQLのバージョンは8.4.xと9.0.xに対応しています。搭載されている機能はOracle版と比べるとまだ少ないですが、SQLクエリーによる検索の際にDaylightのSMARTS検索機能やFingerprintによる類似構造検索機能を利用できます。また、大量のデータに対するカノニカル化・分子情報の算出などの化合物処理もSQLの関数により実施できます。対応するDBが増えたことでDayCartの適用範囲が広がり、より汎用的なDBカートリッジとなりました。

なお、現在開発中のDayPort (セマンティック検索ポータル) でもPostgreSQLの機能が利用されています(図1)。DayPortではテキスト情報だけでなく化合物の構造情報も含めたセマンティックな検索を実現しています。DayPortについては2011年4月発行の第18巻第2号でも紹介していますので、あわせてご参照ください。

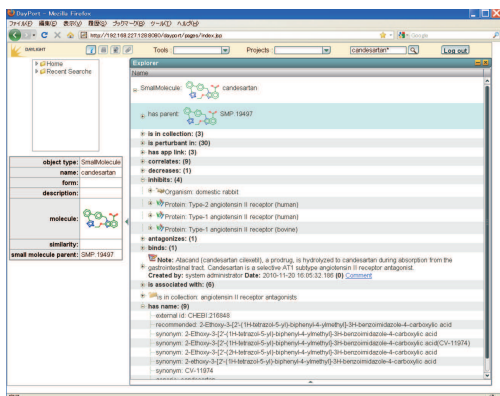


図1: PostgreSQLを利用するDayPort (開発中)

■CLogP/CMRバージョンアップ

今回のバージョンアップにあわせて、CLogPのアルゴリズムバージョンは5.4に、データベースバージョンはv28にそれぞれ更新されています。使用しているフラグメント数は10%ほど増加しています。LogP値を持つフラグメント (logpstar) のデータ数は300件ほど増加しています。

フラグメントの件数が増加しただけではなく種類も増えています。従来から使用されているSMILES文字列による部分構造に加えて、新たにSMARTSパターンもフラグメントとして採用されています。これにより、複数の類似する部分構造フラグメントをより少ないSMARTSパターンで表現したり、SMILESでは表現できないような構造もフラグメントとして検出できるようになります。

■対応OSの変更

新バージョンのLinux版ではサポートOSに変更があり、Red Hat Enterprise Linux(RHEL)5以降のみの対応となりました。RHEL4以前のサポートは終了となりました。このため、現在ご利用されているDaylight製品のアップグレードを検討される場合は、ご利用になるOS環境にもご注意ください。新バージョンのWindows版ツールキットは現在Daylight社にて準備中です。CCG社MOEにDaylightツールキットの機能を搭載したuMOEについては、ツールキットの準備が完了次第ご用意させていただきます。MOEを通してDaylight純正のSMARTS検索機能やTHOR/Merlinデータベース検索機能を利用されている方は、今しばらくお待ち頂けますようお願い致します。なお、Windows版でのご利用環境に変更はありません。

■バグ修正

これまでのバージョンでは発見されていなかったり、未対応となっていたマイナーバグがいくつか修正されています。例えば、mol2smiプログラム (Convertパッケージ) の環情報の取り扱いに含まれていたバグや、SMARTSで再帰的表現を用いた場合のエラー情報の取り扱いなどのバグが解消されています。Webサービスプログラムで入力した化合物構造がヌル構造に変換された場合に発生するエラーにも対処しています。また、MCL (Merlin Control Languageプログラム) の説明資料にも若干の修正が加えられています。

■その他

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。