

MOE 2005.06 -技術サポート情報紹介-

弊社では保守契約を締結されている方を対象に、メール等によるご質問受付、定期トレーニング、SVLのカスタマイズ、MOE Service Pack等、MOEに関する様々な技術サポートを提供しております。これらの中で2006年から更新されている点をご紹介致します。詳細は下記サイトをご覧ください。

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/ccg/support/index.html>

MOEトレーニング新コース

「ライブラリ設計」開設

2006年1月より新しく「ライブラリ設計」コースを設けました。

年々膨大になってきている化合物ライブラリから、いかにして効率良く候補化合物を含むライブラリへと絞り込んでいくかが重要な課題になっています。そのような作業の流れの中で使われる手法の説明と、実際にMOEを使用した応用例の実習を行います。取り上げる項目は以下の通りです。

1. QSARコース復習（記述子計算・主成分分析）
2. フィンガープリント計算・類似構造検索
3. クラスタリング
4. 多様性抽出・MolFilter・Holefiller
5. 分子重ね合わせ・ファーマコフォアモデル自動作成
6. ファーマコフォア検索

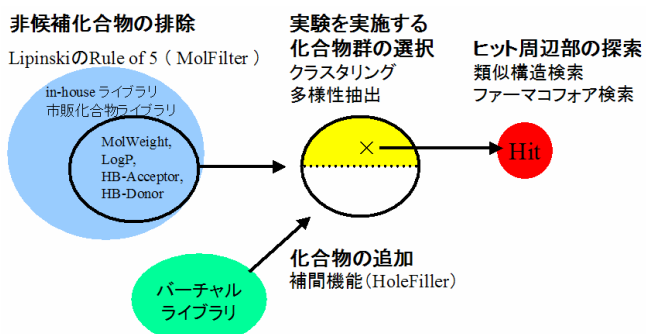


図 1 ライブラリ設計コース概念図

前半部分（1～4）では、フィンガープリントの考え方と、特定のグループに分ける場合に使用されるクラスタリングの手法を学習します。また、初期の絞り込みにおいてnon-druglikeな化合物の排除に利用されるLipinskiのRule of 5をプログラム化したMolFilterや、既存のライブラリに別のライブラリを補間するHoleFillerの機能を取り上げます。

後半部分（5, 6）では、幾つかの活性化化合物があ

り、その周辺部を探索する場合に使われるファーマコフォア検索の手法を使用します。この中では、MOE2005.06で新たに加わった、複数分子を重ね合わせ共通する特徴を自動的に抽出するPharmacophore Elucidationの機能を取り上げ、複数の活性分子からファーマコフォアモデルを作成します。また、作成したモデルでデータベース検索を試みます。

ホームページSVLプログラム集

弊社が開発したSVLプログラム及び、CCG社から報告された修正ファイルを公開しています。2006年にはデータベース・ライブラリ解析の2つの機能が追加されています。

◆Database Viewer SMILES Search

mdbファイルの中からMOEウィンドウ中に表示した分子と同じSMILESを持つ分子を検索するツールです。デフォルトのMOEではできない分子の互変異性体も考慮した検索ができます。

◆K-Mean Cluster

K-Meanアルゴリズムによりクラスタリングを行うプログラムです。計算結果としてクラスタ番号とクラスタ中心を出力します。

MOE Service Pack for MOE 2005.06 リリース

2006年1月に『MOE Service Pack for MOE 2005.06』をリリースしました。弊社がサポート業務の一環として提供しているもので、保守契約締結中の方に送付されています。CDには以下の内容が収録されています。

1. MOE 2005.06の新機能を紹介したリリースノート
2. MOEインストール手順書
3. 弊社定期トレーニングコース資料
4. MOE 2005.06以降の不具合修正コード
5. 弊社で開発したSVLプログラム集
6. 各種トレーニング資料英語版