

# MOE Service Pack for MOE 2006.08 リリース

弊社では技術サポートの一環として、MOE用の追加プログラムや各種資料等を収録したService Packを提供しています。2007年4月に、MOE 2006.08用の「MOE Service Pack for MOE 2006.08」をリリースしました。送付CD-ROMには、ご好評を頂いておりますBulk Modeling & Simulations (BM&S) のMOE 2006.08版、各種トレーニング資料のPDFファイル（日本語、英語）、MOE2006.08リリース後に見つかった不具合を修正するための更新ファイルと、弊社製SVLプログラム等を収録しています。今回は、各コンテンツについて紹介します。

## MOE BM&S 2006.08

2004年より引き続きリリースしております、BM&SのMOE 2006.08版です（図1）。

BM&SはMOEの分子シミュレーション機能をさらに強化するために開発されたアプリケーション群です。さまざまなバルクモデル（分子クラスターや周期境界条件下の分子集合体）を構築し、シミュレーションの実行と解析を行うことができます。マテリアルサイエンス分野だけでなく、ライフサイエンス分野の方にも広く利用されています。

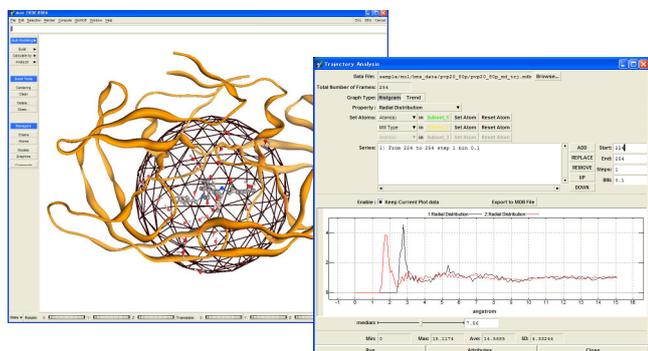


図 1 MOE BM&S 2006.08 :  
リガンド周辺の水に水を配置しMD計算を行った  
り、MDの結果から動径分布関数を計算するなど  
様々な系の構築・解析が可能。

## リリースノート/インストール手順書

MOE 2006.08の新機能や、OSごとのインストール方法を記載しています。

## 各種トレーニング資料

弊社で開催しているトレーニングコース資料と、CCG社が北米で開催しているトレーニングコース資料（英語版）のPDFファイルを収録しています。英語版資料は弊社で開催しているトレーニング資料とは全く別の内容になっており、日本語版資料とは異なるケーススタディを行うことが可能です。また英語版資料は日本で研究している

留学生用のトレーニング資料としても活用されています。

## MOE 2006.08 Patches 2006.0804

MOE 2006.08の更新ファイルです。更新ファイルを適用すると、MOEのバージョンはMOE 2006.0804になり、不具合の修正と一部機能の強化が行われます。

下記対象バージョンをお使いの場合は必ずアップデートを行ってください。

対象バージョン :

MOE 2006.08、MOE 2006.0801

修正および強化 :

下記の機能が修正または強化されます。

- キラル認識に関する不具合
- PDBファイル読み込みに関する不具合
- SDファイルの読み込みに関する不具合と機能強化
- ステレオ画像データ出力に関する不具合
- 共鳴環構造の原子のPriorityの判断をより厳密化

## SVLプログラム

オリジナルのMOEには実装されていない弊社で独自に開発したツールを収録しています。その中からいくつかのプログラムを紹介します。

### ◆Exhibition

分子の回転やリボン描画、輪切り、分子表面の透過度を自動的に変更するツールです。MOEを使ってプレゼンテーションを行う時に便利です。

一定間隔ごとに画像ファイルとして出力する機能もありますので、他のアニメーション作成ツールと組み合わせて静止画からAVIファイルなどの動画ファイルを作成することも可能です（図2）。

### ◆RainbowColorRibbon

タンパク質のリボンを多色のグラデーションで表示するツールです（図3）。N末端は赤色、C末端は紫色で表現します。

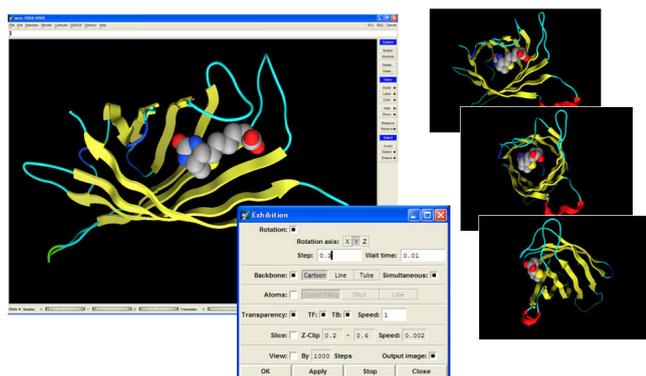


図 2 Exhibitionを使用した分子描画の設定と画像ファイルへの出力

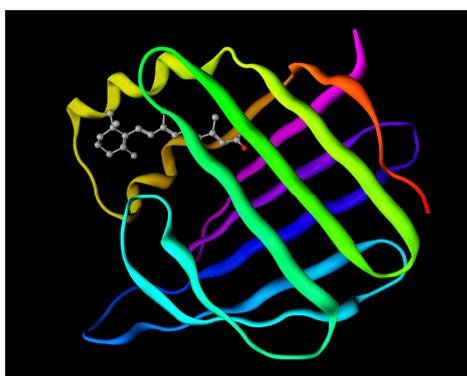


図 3 RainbowColorRibbonを使ったりボン表示

#### ◆k-Means Cluster

k-Meansアルゴリズムを使って化合物ライブラリをクラスタリングするためのツールです。このアルゴリズムは収束の速度が比較的高速であるのが特長です。32種類の記述子を使用してk=10でクラスタリングを行うと1万件のデータは約5秒、10万件のデータは約50秒で収束します(使用したPC: PentiumM 2.0GHz、1GBメモリ)。図4は、1万件のデータに対してk-Means Clusterを使ってクラスタリングし、クラスごとに色分けし3次元プロットしたものです。

#### ◆source\_file

SVLプログラミングを行うための支援ツールです。SVLを使ってプログラミングを行う際には既存のMOEに搭載されている関数のソースコードを参考にすることも多く、対象のglobal関数がどのファイルで定義されているかを探す必要があります。source\_fileを使用すると、関数名(または記述子名)からプログラムファイルを検索して、展開した後に対象の関数行にカーソルを自動で移動してくれます。また関数名からその詳細が説明されているオンラインマニュアルを開く機能も搭載しています。

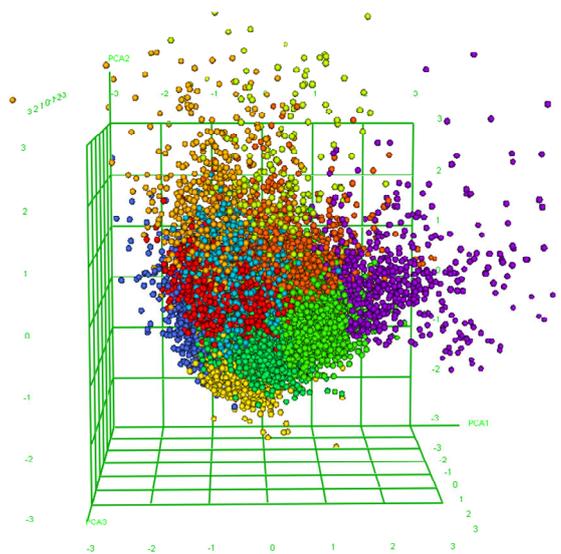


図 4 k-Means法で得られたクラスター

### MOEフォーラム2007 開催のご案内

MOEの販売10周年を記念して「MOE フォーラム2007」を開催します。CCG社やCCG社とパートナーシップを結んでいるBioSolveIT社から開発者を招聘し、MOEの最新トピックスや、新製品のタンパク質複合体データベース解析システム「PSILO」(サイロ)、BioSolveIT社製 創薬支援ツール(表紙、2ページ参照)についてご紹介します。さらにフランス sanofi-aventis社、アステラス製薬株式会社、東海大学から創薬研究の最先端でご活躍されております先生方を招聘し、*in silico* 創薬の成果や今後の発展についてご講演して頂きます。

スケジュールの詳細とお申し込みは下記Webページをご参照ください。

<https://secure.rsi.co.jp/kagaku/cs/seminar/rsi105.html>

皆様のご参加を心よりお待ちしております。

#### 日時:

平成19年7月24日(火)  
10:00-17:30(受付 9:30~)

#### 会場:

ホテルパシフィック東京  
東京都港区高輪3-13-3 品川駅高輪口正面  
参加費: 無料

#### お問い合わせ先:

E-mail: [support@rsi.co.jp](mailto:support@rsi.co.jp)  
TEL: 03-3553-9206