

MOE -KNIMEインターフェイス (MOE/knime) リリース-

統合計算化学システムMOEの開発元であるCCG社からKNIMEインターフェイス (MOE/knime) がリリースされました。このインターフェイスを利用することでMOEを用いた解析プロセスをワークフロー型に分かりやすく定義することができ、様々なワークフローを用意しておくことでルーチンワークとなった化合物処理を効率よく行うことができます。

KNIMEについて

KNIME^{*)}(ナイム)は、ドイツのコンスタンツ大学で開発された無償で利用できるワークフロー作成ツールです。一つの処理をノードという形式で定義して、それらを結合し組み合わせることで、データの読み込み、計算、解析といった一連の流れを簡単かつ分かりやすく定義することができます。すでに100を超えるノードが無償で公開されており、データマイニングツールのWekaや統計解析ツールRなどの外部ツールを使用したノードも公開されています。またJavaを利用してその他の外部ツールを実行するためのノードをユーザ自身で作成することも可能です。

*) <http://www.knime.org/>

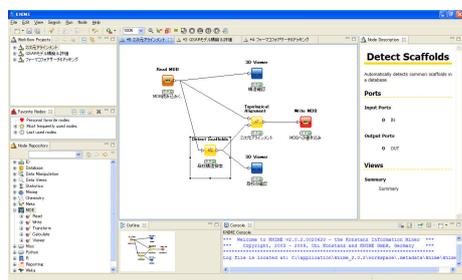


図1 KNIMEの画面。中央にワークフロー、左下に登録されたノードが表示されている。

MOE/knimeによるワークフロー例

MOE/knimeには、50を超えるMOEの機能がノードとして登録されています。今回、それらを使った解析例を紹介します。

◆QSARモデル構築と評価

図2は活性予測モデルの構築とその評価を行うワークフローです。評価対象の化合物は、CDK (Chemistry Development Kit)のスケッチャーノードから入力します。

◆ファーマコフォアサーチとドッキング

図3はSDファイル中の分子をフィルタリングし、ファーマコフォアサーチ、ドッキングと、リガンドベースから受容体ベースへのスクリーニングを連続して行うワークフローです。

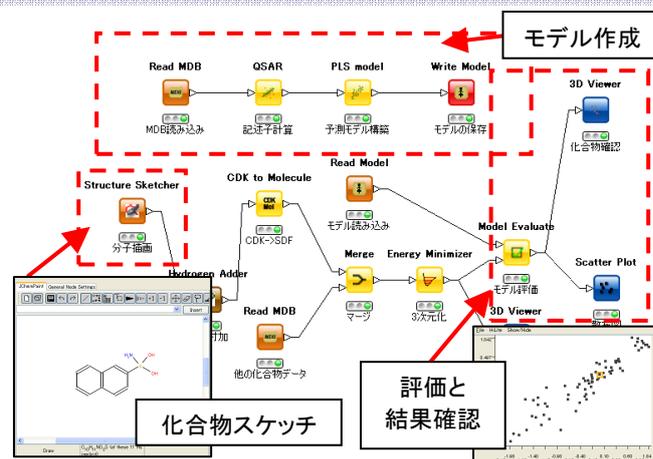


図2 QSARモデルの作成と評価のワークフロー

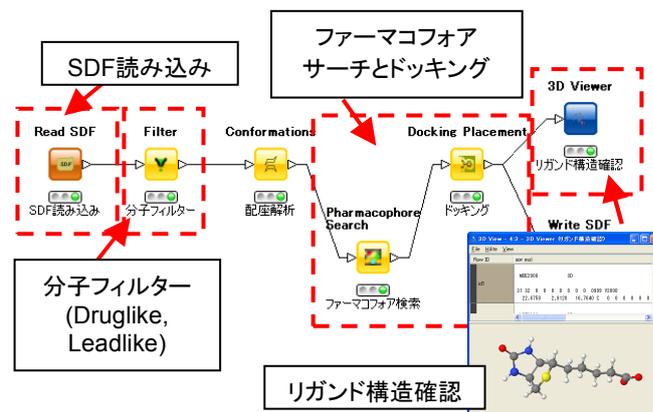


図3 ファーマコフォアとドッキングを利用したスクリーニングのワークフロー

◆その他のMOEノードの例

- ・入出力：MOE、MDB、SDF、ASCII、SMILES
 - ・化合物の前処理：Wash、重複チェック、マージ、分子名出力
 - ・計算：構造最適化、フラグメント化、母核探索、類似構造検索、BREED、SARReport
- また、KNIMEが持つ既存ノードを組み合わせることで、MOEによる処理と外部ツールによる処理を容易に自動化できます。

お問い合わせ

MOEの保守契約をされている方を対象に、無償でインターフェイスをご提供します。ご希望の方は弊社までお問い合わせください。