

KNIME で動作する MOE インターフェイス

MOE-Extensions for KNIME

MOE-Extensions for KNIME は、MOE をワークフローツール「KNIME^{*1}」上で使用するためのインターフェイスです。KNIME は様々な解析を行うためのノードをマウスで繋ぎ、データアクセスからデータ解析、レポートまでの一貫した処理をワークフローとして定義できます。MOE による処理を KNIME の中で実行するための 150 種以上の解析ノードを提供しています。MOE-Extensions for KNIME を利用することで、化合物や受容体構造の前処理、ドッキング、FBDD、ファーマコフォア検索などの MOE による連続的な処理を容易に定義できます。MOE-Extensions for KNIME は MOE の保守契約中であれば無償で入手できます。

MOE-Extensions の特徴

- 誰でも分かりやすい形で計算プロトコルを定義
- プログラミング不要で作業を自動化
- 処理の追加、削除、順番の入れ替えが容易
- 創薬研究のための多数のノードを提供
- KNIME の他ノードとの連携が容易（機械学習等）
- ユーザーオリジナルノードの作成が可能

簡単かつ柔軟なワークフロー作成

- MOE と同様の操作がしやすいように工夫された設定パネル
- 多彩なグラフ表示に対応、わかりやすい計算結果の表示
- MOE を用いたワークフロー例
 - 化合物処理
 - AutoQuaSAR
 - ドッキングシミュレーション
 - ファーマコフォア
 - タンパク質デザイン
 - 抗体モデリング など

わかりやすいノード開発

- ノードの機能だけでなく、パネル設定やノードの入出力に至るまで SVL のみで開発可能
- コンパイル作業が不要でデバッグが容易

その他機能

- 構造データ以外にもモデルファイルや配列をワークフローで利用可能
- KNIME メニューからインターネット経由でのインストールに対応

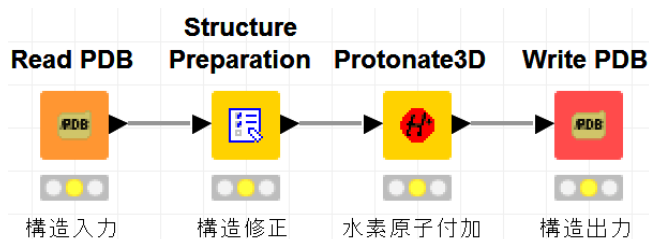


図 1. PDB データを読み込み、前処理、保存を行うワークフロー

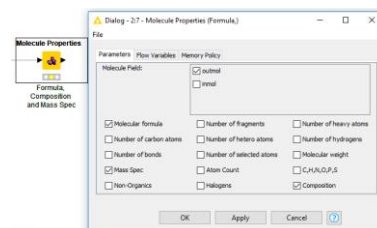


図 2. 設定パネル例

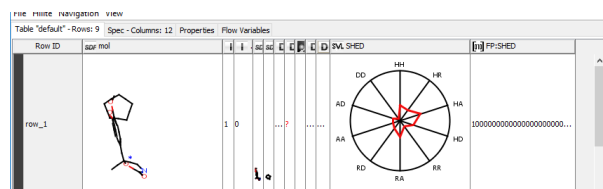


図 3. 計算結果出力例

```

40 // CUSTOMIZE THIS PART
41
42 const NEWFIELDNAME = 'NewMoleculeField';
43 const NEWFIELDTYPE = 'mo';
44
45 local function fromsnippet[]
46
47     // ADD SNIPPET HERE return dmol vector, string or numeric value
48
49 endfunction
50
51 // END OF CUSTOMIZATION
  
```

図 4. SVL によるノード開発

MOE-Extensions の入手方法がご不明な場合は弊社までお問い合わせください。

1: <http://www.knime.org/> 