

# Discovery Studio

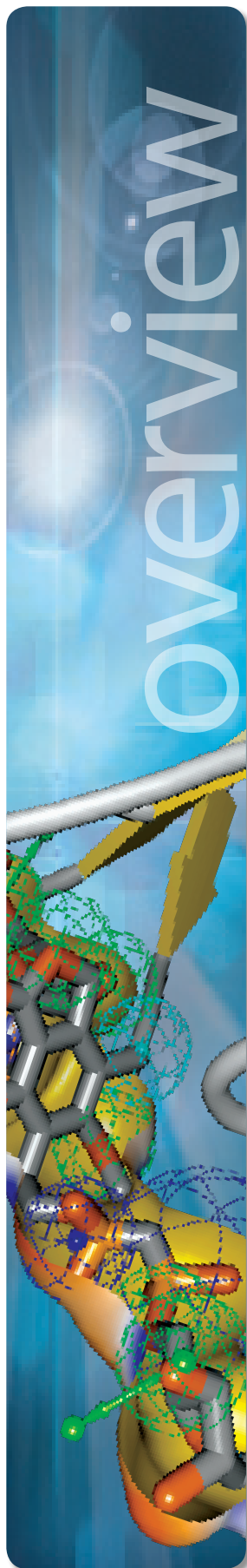
## Life Science Modeling and Simulations

Discovery Studio® は、創薬研究やタンパク質モデリング研究を効果的に行う、単一で使いやすい統合グラフィックインタフェースです。今日的な創薬の課題に取り組むために、Discovery Studio には、長年にわたり実績のある業界標準のアプリケーション (Catalyst、MODELER、CHARMm など) と、最新技術の両方が組み込まれています。Discovery Studio は、Pipeline Pilot Enterprise Server™ オペレーティングプラットフォーム上に構築されており、タンパク質モデリング、ファーマコフォアモデルの解析、Structure Based Design はもちろんのこと、他のベンダーのアプリケーションソフトもシームレスに統合、実行することができます。

### Platform

Product	Description
Discovery Studio Standalone	Discovery Studio Standalone は、モデリング研究者向けに設計された分子モデリングプラットフォームです。Pipeline Pilot のオープンプラットフォームによって強化されたこのスタンドアロン環境には、Discovery Studio に搭載されたサイエンスの粋を使用して、モデル設計やモデリングの実行を行うのに必要な基本ソフトが全て組み込まれています。分子の 3D 描画、動的変化の視覚化、3D グラフ化など、その他多数の機能を使用することにより、生物学データや化学データを簡単に視覚化、モデル化し、解析することができます。また、この構成では、豊富に用意された Perl ベースのスクリプトコマンドにアクセスできます。
Discovery Studio Visualizer Client	Discovery Studio Visualizer Client は、Discovery Studio に搭載されたサイエンスのための強力なグラフィックインタフェースです。DS Visualizer Clients は、リーズナブルに導入ことができ、管理が容易であると同時に、世界トップレベルの科学技術にアクセスすることができます。Pipeline Pilot Server と併用することにより、DS Visualizer Client は、データ、ワークフロー、計算資源に対する、非常に優れた共有機能を発揮します。豊富な Perl ベースのスクリプトコマンドとカスタムのスクリプトを使用してインターフェースアクションの再実行や DS 上のデータモデルの処理といった一般的なモデリング操作を自動化、あるいはカスタマイズすることができます。スクリプトを使用できるアクションは、分子の重ね合わせ、キラリティーと価数のチェック、DSC による二次構造の予測、静電場ツールへのアクセス、制約/制限の管理、表面の表示など、膨大な数に上ります。
Pipeline Pilot Server	Pipeline Pilot では、業界規模のデータフロー制御や強力なマイニング機能により、情報を最大限に活用することができます。データの検索、操作、計算によるフィルタリング、表示などのオペレーションを行うための、個別の設定が可能で何千ものコンポーネントを有し、これらを使用することにより、データ処理フローを視覚的に構成することができます。作成したプロトコルは、企業レベルで公開することもできます。別の人が呼び出したり、シンプルな Web インタフェースで個別のデータを使用して実行したりすることができます。
DS Developer Client	Pipeline Pilot クライアントの簡易バージョンです。既存の Discovery Studio ワークフローをカスタマイズできます。カスタマイズに必要なコンポーネントはすべて揃っており、既存の DS プロトコル/コンポーネントから、コンポーネントの追加や削除を行うことができます。新しいコンポーネントを作成して既存の DS プロトコルに追加することもできます。DS プロトコルの自動化範囲を拡大すると共に (特定フォルダの全ファイルに対して DS プロトコルを自動実行するなど)、外部リレーショナルデータベースにも簡単に接続できます。また、サードパーティのアルゴリズムを統合できます。(記述子計算用の独自コードである CORINA など)。

カスタマイズしたプロトコルは、DS Developer Client で直接実行することも、ユーザ領域に保存して、インタラクティブなモデリングのために DS のインタフェースから実行することもできます。また、Accelrys Forums には Discovery Studio 用にカスタマイズされたコンポーネントやプロトコルが多数公開されており、無料でご利用いただけます。



# Discovery Studio

## Life Science Modeling and Simulations

### Platform (continued)

Product	Description
Discovery Studio Free Visualizer	Discovery Studio Free Visualizer は、エキスパートレベルの解析ツールを必要としない研究者（例えば実験者）やマネージャに理想的なソリューションです。多くの一般的なタスクやコマンドが Perl ベースのスクリプト API として用意されているので、一般的なモデリングタスクの自動化やカスタマイズが可能です。多種多様なフォーマットのタンパク質構造や分子構造、計算データを、わかりやすく一貫した方法で視覚化し、共有できます。
ActiveX Control	Discovery Studio Visualizer ActiveX Control は、完全に統合された Windows 環境用の 3D 分子描画機能です。科学的成果を、プレゼンテーションや Web ページなどを使用して同僚と共有することができます。この ActiveX Control は、Internet Explorer、PowerPoint、VC クライアントなど、COM コンポーネントをホスティングできるすべてのアプリケーションに組み込むことができます。ActiveX Control の OpenGL 機能により、洗練された分子画像を描画できます。また、ビューア独自のファイル形式だけでなく、業界標準の分子ファイル形式の多くを読み込むことができます。

### Sequence Analysis

Product	Description
DS Sequence Analysis	対象になる配列と、既知タンパク質の配列を比較することによってタンパク質の生物学的機能を同定するための最初のステップを実行します。DS Sequence Analysis は、一般的な BLAST あるいは PSI-BLAST アルゴリズムを使用します。インターネットを介して NCBI サイトや、ローカルマシンにインストールしたデータベースに対して、ターゲットになる配列の同源性検索を実行します。結果は、他の Discovery Studio ソフトウェアでの更なる解析と操作を容易にするインタラクティブ・レポート・フォーマットで提示されます。また、系統学的解析、Evolutionary Trace 解析の機能を持ち、結果を階層クラスタリングして dendrogram (系統樹) として表示できます。また、タンパク質の三次元構造に ET 解析結果を表示することもできます。抗体モデリング分野の新機能としては、CDR 情報データベースを使用して、CDR 情報の同定やアノテーション処理を自動化できます。最良のアラインメントが登録された配列アラインメントファイルにより、CDR 領域のループグラフトの自動化が可能になりました。

### Protein Modeling

Product	Description
DS MODELER	与えられた配列を既知の 3D タンパク質構造にアライメントし、洗練されたタンパク質のホモロジーモデルを自動的に作成する業界標準のソフトウェアです。DS MODELER は、新規薬物ターゲットの発見と、ファミリー内のタンパク質構造と機能の研究に理想的なソリューションです。また、モデルの質の評価、リガンド分子などのタンパク質モデルやタンパク質変異体の構築、DOPE エネルギー関数を基にしたループ構造の構築、構造を基にしたアラインメントの実行、配列プロファイルの作成、リモートデータベースでのホモロジーモデルの検索などを扱うことができます。さらに、相関関係が低い場合において、配列プロファイル情報を使って配列アラインメントを改善させる新しい手法である SALIGN が実装されました。シミュレーションや Structure Based Design などの Discovery Studio ソフトウェアと組み合わせると DS MODELER を使用することで、タンパク質構造と機能に対する更なる知見を得ることも可能です。

Product	Description
DS Protein Refine	CHARMmに基づいて、自社で開発したアルゴリズムを用いて、タンパク質構造のループ領域を最適化できます。ループ領域についてエネルギー的に最適化された変異型の構造を複数作成します。さらに、系統的な検索方法とCHARMmのエネルギー極小化に基づいて自社開発されたアルゴリズムを用いて、タンパク質構造の側鎖を最適化します。これらの最適化アルゴリズムのどちらも、初期構造には影響されません。(ab initio 的アプローチ)
DS Protein Families	3D 構造上で保持されている残基の位置と同様に、タンパク質ファミリーでの配列保持パターンを解析することによって、分子レベルでタンパク質機能のメカニズムについてより深い理解を得ることができます。三次元構造上の情報の表示、階層クラスタリング手法を使ったタンパク質ファミリーのデンドログラムを作成する Evolutionary Trace 解析、配列や構造を基にしたタンパク質ファミリーの配列アラインメントが実行できます。
DS Protein Health	モデリング研究、あるいは実験データから得られるタンパク質構造(または構造の一部)について有効性を調べることができます。DS Protein Health では Profiles-3D Verify と呼ばれる方法を用いて、モデルの構造的環境をアミノ酸にとって好ましい環境と比較することでタンパク質構造の評価を行います。この方式によってタンパク質構造内のミスフォールドの位置を特定し、どの部分で構造的なパッキングを再考する必要があるのかを示すことができます。さらに、タンパク質構造の質を調べ、“Protein Health” ツールパネルを用いて異常のある領域を解析します。
DS Protein Docking	DS Protein Docking を使用すると、新しい標的のタンパク質-タンパク質構造の相互作用を迅速かつ正確に予測することができます。幅広く知られている ZDOCK アルゴリズムを使用して剛体ドッキングを迅速に行います。ZDOCK アルゴリズムでは、pair-wise 形状相補性関数を使った FFT ベース手法でドッキング構造を同定し、原子間の近接エネルギーに基づいたヒット率をスコアリングします。ZRANK スコアリング関数を使用して、ドッキングポーズの精度を高めます。RDOCK アルゴリズムを使用して、CHARMm エネルギーの極小化に依るドッキング結果の最適化、CHARMm エネルギーおよび脱溶媒和エネルギーによるポーズのスコアリングを実行できます。高度なクラスタリング手法を用いて、結果を絞り込み、ポーズを同定します。

## Biopolymer Building and Analysis

Product	Description
DS Biopolymer	DS Biopolymer で簡単な生体分子モデル構築と静電場解析を実行することができます。DS Biopolymer はタンパク質とペプチドの構築と修正、タンパク質の構成要素の分割 (Split コマンド) や整形 (Clean コマンド)、ペプチドとタンパク質のプロパティ解析レポートの迅速な作成、ポアソン-ボルツマン静電場 (DelPhi) で高分子または低分子の静電ポテンシャルと溶媒和エネルギーを計算するプロトコルへのアクセスを提供します。Biopolymer を使用するとアミノ酸のプロトン化状態を、迅速かつ正確に見積もることができます。電荷見積もりは Generalized Born モデルに基づいており、解離定数、pH 滴定曲線、フォールディングのエネルギー全体を正確に予測することができます。また、X 線電子密度マップ上にタンパク質モデルを構築したり (X-BUILD)、リガンド分子フィッティング (X-LIGAND) を行うことができます。



# Discovery Studio

## Life Science Modeling and Simulations

### Simulation

Product	Description
DS CHARMM Lite	DS CHARMM Lite はエネルギー最小化を備えた CHARMM のカスタマイズされたバージョンで、予測されたレセプター親和性に基づくリガンドをより正確にスコアリングし、優先順位を決めることができます。DS CHARMM Lite は十分に検証された CHARMM 力場と CFF (Consistent ForceField) 力場を用いて in situ リガンド極小化計算を実行します。受容体から選ばれた原子を極小化プロトコルに含めることもできます。多数のリガンドのハイスループット解析に適用でき、しかも並列計算やバック・グラウンド・モードで実行することができます。
DS CHARMM	<p>業界標準のプログラムを活用して、低分子リガンドから多成分の生体分子複合体まで、分子のエネルギーやダイナミクスを計算することができます。DS CHARMM は定期的に更新され、アカデミックコミュニティで開発された最新の機能が組み込まれます。DS CHARMM は、アクセルリスの創薬アプリケーションである Discovery Studio に完全に統合されました。ドッキングの前に、CHARMM ベースのループサンプリング、側鎖最適化手法を用いて、柔軟性のある受容体の構造をサンプリングします。CDOCKER は低分子のドッキングを正確に実行する上で CHARMM が威力を発揮します。Constraint をファーマコフォアの形で追加することにより、予備知識を活かしてドッキングを行うことができます (追加の製品が必要です)。リガンドのドッキングポーズとハイ・スループット・モードの受容体との相互作用エネルギーを正確に算出し、相互作用エネルギーの残基レベルの分析を行います。必要に応じて隣接する受容体の原子や残基を極小化することにより、他のドッキング手法から導き出されたポーズを最適化し直すことができます。DS CHARMM で利用できる力場ベーススコアリング機能 (MM-PBSA、MM-GBSA、LIE) は、ドッキングポーズの精度を高めます。また、DS CHARMM は、分子システムのエンタロピーエネルギーを計算することもできます。(標準モード、準調和モード、構成成分の並進/回転のオプションがあります)。CHARMM の高速で正確なタンパク質解離定数推定機能を使用して結合エネルギーとタンパク質安定性を計算すると、タンパク質-リガンドドッキングやタンパク質-タンパク質ドッキングの精度が向上します。</p> <p>十分に検証されている力場 (CHARMM、charmm27、charmm22、charmm19) や、Poisson-Boltzmann (PB)、Generalized Born、Generalized Born with molecular volume (GBMV)、Generalized Born with simple switching (GBSW)、などの溶媒モデルを活用することができます。CHARMM スクリプト言語 (コマンドライン) を使用すると、非常に柔軟なカスタマイズを行うことができます。スタンドアロン型のタイピングツールをバッチモードで実行すると、CHARMM 力場 (自動パラメータ予測オプションも利用可能) を用いて、化合物ライブラリをタイピングすることができます。適切な力場と静電場に対する PME、溶媒和時に対イオンを追加する機能を用いて核酸のシミュレーションを行うことができます。Pipeline Pilot クライアントから CHARMM にアクセスすれば、複雑なシミュレーションワークフローを作成し、これまでにないカスタマイズが実現します。お使いのワークフローに、ホモロジーモデリング、ドッキング、ファーマコフォア解析などの一連の研究過程で必要な計算アプリケーションが統合され、Pipeline Pilot や Discovery Studio で利用することができます。</p>
CFF Advanced Class II Forcefield	DNA、RNA、炭水化物、脂質、タンパク質、ペプチド、低分子などのモデルを最適化でき、しかもその正確さには高い信頼が置けます。CFF (Consistent Forcefield) の力場パラメータは、19,432 個の分子構造に及び 1,768 個の異なる分子プロパティを計算することで開発されました。これにより、大部分の生体分子や低分子に適用できる強力で多様なパラメータ群になっています。
Merck Molecular Force Field (MMFF)	高く評価されている Merck Molecular 力場を使用して、高分子とリガンド間のエネルギー特性と相互作用について研究することができます。MMFF94 では、有機システムや生物有機化学システム、酵素結合に不可欠な分子間の相互作用が幅広くパラメータ化されています。

## Simulation (continued)

Product	Description
DS Analysis	<p>回転運動半径 (Radius of gyration) の計算、動径分布関数やトラジェクトリのクラスタリングによる直感的で簡単な操作で、MD トラジェクトリを解析することができます。トラジェクトリのクラスタリングでは、デンドログラムのプロットや主成分解析、Phi-Psi 角の経時変化からクラスタを選択することができます。RMSD や水素結合、多数のドッキング済みリガンドに近接しているアミノ酸残基を手間を掛けずに計算することができます。</p> <p>”Protein Health” ツールパネルを使用すると、タンパク質構造を確認し、異常のある領域を解析することができます。MODELER DOPE (Discrete Optimized Protein Energy) エネルギー関数に基づいて、モデルの質を評価することができます。</p>

## Receptor-Ligand Interactions

Product	Description
DS Flexible Docking	<p>CHARMm の正確な受容体サンプリング能力と、効率のよい特性ベースのドッキングを組み合わせた、この新しい手法を使用すると、合理的なフレキシブルドッキングを行うことができます。DS Flexible Docking は、フレキシブルドッキングを行う現実的な方法です。たとえば、活性サイト内の側鎖の、既存の低エネルギーコンフォメーションの影響を受けるような低分子のドッキングを行うことができます。DS Flexible Docking は、マルチコアマシンで並列処理を行ったり、仮想ハイ・スループット・スクリーニングに対するクラスターを計算することができます。</p>
DS LigandFit	<p>DS LigandFit では、モンテカル口法によるリガンドコンフォーマのサンプリングと、リガンドと結合サイトの形状に基づくドッキングを実行します。DS LigandFit は、マルチコアマシンで並列処理を行ったり、仮想ハイ・スループット・スクリーニングに対するクラスターを計算したりすることができます。</p>
DS LibDock	<p>受容体の結合サイトの極性/無極性 (ホットスポット) を使用すると、効率のよいドッキングを行うことができます。業界標準の Catalyst エンジンは、低分子のコンフォメーションを作成して、ドッキングの精度を高めることができます (DS Catalyst Conformation の導入をお勧めします)。DS LibDock は、マルチコアマシンで並列処理を行ったり、仮想ハイ・スループット・スクリーニングに対するクラスターを計算することができます。</p>
LigandFit/CAP	<p>Chemicals Available for Purchase (CAP) と CAPScreening データベースに装備された試薬ベンダーカタログにアクセスすれば、新薬候補を手早く検索することができます。LigandFit/CAP は、ドッキングのために 3D データを必要としているとき、ベンダーのライブラリから得られるのは 2D のデータのみであるといったフラストレーションから開放してくれます。</p>
DS LigandScore	<p>十分に検証され、洗練されたスコアリング関数とその個々の記述子で、リガンド-タンパク質相互作用を評価できます。DS LigandScore はドッキングの際の正しいポーズと誤ったポーズを区別し、予測されたりリガンドに優先順位をつけることでスクリーニングや合成に役立ちます。パラメータはカスタマイズ可能で、ユーザの設定を保存することができ、他のユーザと共有できます。DS LigandScore マルチコアマシンで並列処理を行ったり、仮想ハイ・スループット・スクリーニングに対するクラスターを計算したりすることができます。</p>



# Discovery Studio

## Life Science Modeling and Simulations

### Receptor-Ligand Interactions (continued)

Product	Description
DS Ludi	<p>DS Ludi は de novo 創薬アプリケーションで、新薬になりうる scaffold を迅速に同定し、受容体の結合ポケット内の相互作用部位を利用して、フラグメントライブラリからフラグメントの配置やスコアリングを実行します。</p> <p>DS Ludi で、ligand scaffolds ライブラリをスクリーニングしたり、受容体の結合サイト内でリガンドの置換様式を修正することができます。フラグメントライブラリは、カスタムのフラグメントを加えることも可能です。</p>
DS De Novo Evolution	<p>DS De Novo Evolution で、scaffold 上のフラグメントを連結させたり構築したりすることにより、新薬になりうる分子を作成することができます。速度と精度で最適化された3つのモードから選択することができます。Quick モードでは、DS Ludi (必須)と DS LigandScore (任意) のスコアのどちらかによって順位付けが行われ、最もスコアの良い阻害剤が提示されます。Full Evolution モードでは、阻害剤の作成で最後まで残ったものが選択されます。Combinatorial モードでは、scaffold の誘導体の組み合わせすべてがリストアップされます。</p>
Ludi/CAP	<p>Ludi/CAP は市販の化合物の構造データベースである Chemicals Available for Purchase (CAP) と、スクリーニングライブラリの供給元のデータベースである、CAPScreening に含まれる構造データをフラグメントライブラリとして提供します。Ludi/CAP から得られる既知の化合物は、新規化合物の合成への足掛かりとなり得ます。</p>

#### 受容体-リガンドの相互作用に関する追加機能

- ・ ドッキング前のリガンドデータの調整を、ハイ・スループット・モードで実行することにより時間を短縮。指定された pH 範囲におけるイオン化状態の列挙、互変異性体および異性体の作成、Lipinski フィルタの適用、三次元配座の作成のすべてを、ボタン一つで実行することができます。
- ・ タンパク質-リガンド複合体の相互作用、配列-活性と構造-活性の関連性などをヒートマップで視覚的に解析できます。
- ・ Discovery Studio から GOLD\* ドッキングプロトコルにアクセスすることができます。

\*GOLDとはジェネティック・アルゴリズム・ベースのドッキングプログラムで、Cambridge Crystallographic Data Centre のものです。GOLDの独立したライセンスが必要になります。詳細は [www.ccdc.cam.ac.uk](http://www.ccdc.cam.ac.uk) をご参照下さい。

### QM/MM

Product	Description
DS QUANTUMm	<p>密度汎関数理論プログラムである DS DMOL3 Molecular (QM)と CHARMm (MM) を組み合わせた正確な量子力学/分子力学 (QM/MM) 的手法を用いることで、リード化合物の最適化におけるタンパク質-リガンドモデリングの精度を高めます。さまざまな 交換-相関汎関数や基底系を使用して、エネルギー計算や構造最適化を単一の場所で集中処理し、ドッキングアプリケーションやシミュレーションアプリケーションに正確なリガンド部分電荷を取得します。また、カチオン-<math>\pi</math> 相互作用や金属-リガンド-受容体相互作用などの特殊な相互作用を高い精度でモデル化します。簡単なジョブ設定と設定済みパラメータセットのカスタマイズによって、これらの QM/MM 法すべてにアクセスできます。</p>

## Pharmacophore Modeling and Analysis

Product	Description
DS Catalyst Build and DS Catalyst Search	ファーマコフォアモデルの検索に利用する 3D 化合物データベースを容易に作成できます。DS Catalyst Build を利用すると、どんな構造を持つ化合物でも、生理的条件下でエネルギー的に許容されるコンフォメーションをサンプリングして 3D データベースに保存できます。DS Catalyst Search は傑出した性能を備えており、ユーザのファーマコフォアモデル、指定された 3D 形状、部分構造を含むクエリなどを用いてデータベース検索を迅速に行うことができます。3D Catalyst データベースには詳細なコンフォメーションの情報が保存されているため、各化合物について分子の複数の幾何学的配置を検索できます。
DS Catalyst Hypothesis	定性的または定量的なファーマコフォアモデルを自動的に作成し、ターゲットへの結合に必要である基本的な化学的特性や構造的特性を識別できます。ユーザは既知の一連の化合物から自動的に仮説を作り上げることが可能です。不活性分子の構造から、立体障害の存在を予測し、排除体積を規定してモデルを改良できます。また、医薬品候補や既知の活性化合物のアラインメントをもとに、生理活性を考慮せずにファーマコフォアの仮説を展開することもできます。
DS Catalyst Shape	分子が占めるべき形状を検索クエリに含めることにより、受容体の活性サイトによる三次元の空間的制約を満たすことのできる化合物を見出すことができます。3D データベース検索を行い、同様の形状をもつ分子を、具体的な化学構造に関係なく特定します。全体的な形状を検討するため、検索のヒットは標準的な 2D 検索に比べるとトポロジー的多様性に富んでおり、生物学的ターゲットの形状をかなり正確に表現する一連の化合物が得られます。
DS Catalyst Score	データベース検索から化合物を迅速に評価し、優先順位を付けることができます。データベース検索から得られたヒットの結果をユーザの仮説に当てはめ、どの化合物がユーザのファーマコフォアの要件を最も反映するかを判別します。DS Catalyst Score は、各々の化合物について、予測フィット値あるいは活性値を算出します。ヒットリストの件数に応じて、ファーマコフォアモデルの最小限、または最大限のフィーチャ数を指定することにより、ユーザは検索結果を広げたり狭めたりすることができます。また、具体的な分子を複数並べて、分子の構造特性や化学特性を比較し、それらの分子の類似度を判別することもできます。
DS Catalyst Conformation	コンフォメーションモデルを迅速に算出し、これによって低分子がエネルギー的にとりやすいコンフォメーションの全てを、十分にまた多種多様に表現することができます。新しい CAESAR アルゴリズムを用いて迅速に分子が生理的条件下で取り得るリガンドのコンフォメーションを作成することができます。6 つのコンフォメーションジェネレータの中から、それぞれの創薬プロジェクトに最も相応しいアルゴリズムを選べます。各アルゴリズムはユーザに合わせて最適化し、コンフォメーションのサンプルが取れるよう、パラメータをカスタマイズすることができます。



# Discovery Studio

## Life Science Modeling and Simulations

### Pharmacophore Modeling and Analysis (continued)

Product	Description
DS Catalyst Structure Based Pharmacophore (SBP)	DS SBP の Ligand Profiler による迅速で簡潔な活性プロファイリングの導入で、創薬プロセスのごく初期の段階で副作用の可能性を把握することができるようになったため、全く新しい価値がもたらされています。Inte:Ligand 社提供の膨大なファーマコフォアデータベース (HypoDB) を使用することができます。実験から得た化学的、構造的なタンパク質の知識を、ユーザのファーマコフォアモデルに組み入れることができます。これらのモデルを利用して 3D データベースを検索すると、ユーザ指定の受容体に個別に適合するようにヒットリストを作成できます。活性サイトから作成されたファーマコフォアフィーチャーは、受容体に関する知識を用いて編集し、クラスタリングすることが可能なため、仮想スクリーニングについて必須の要素だけを保持することができます。
DS De Novo Ligand Builder	DS De Novo Ligand Builder は、独自のフラグメントベースのデザインツールです。このツールでは、ファーマコフォアを使ってフラグメントの配置を導き出します。これにより、タンパク質の活性サイトを補完するだけでなく、お互いに補完し合って現実的な新薬候補を作成することができます。この強力なツールを使用すると、特定の創薬ターゲットへの結合に不可欠と考えられる特性をもつ、新しい化合物の完全なリストを迅速に作成することができます。
HypoDB	HypoDB は、Inte:Ligand 社の高品質ファーマコフォアモデルを使用したデータベースであり、187 ターゲットから 1846 のファーマコフォアモデルが格納されています。このデータベースは、治療に関連する多様なターゲットを対象とした候補化合物の選択性や特異性の調査に使用できます。このプロファイリング手法は、薬物の潜在的な作用メカニズム、潜在的な反作用ターゲット、新薬候補化合物の新規ターゲットの特定にも使用できます。

### QSAR and Library Design

Product	Description
DS QSAR and DS QSAR+	DS QSAR を使用すると、活性と相関関係にある、多数の分子記述子に簡単にアクセスすることができます。ベイジアンモデル、重回帰、Partial Least Squares (PLS)、Genetic Functional Analysis (GFA) などのモデリング技術を気軽に適用することができます。高度なニューラル・ネットワーク・コンポーネントと半経験的量子力学法を採用し、何千もの候補化合物の電子状態に対する非常に正確な高速計算を実現する VAMP 記述子の追加により、パッケージの基本機能が拡張されています。
DS DMol <sup>3</sup> Descriptors	密度汎関数理論 (DFT) プログラムである DMol <sup>3</sup> は、化合物の電子状態の計算を非常に高い精度で行うことができます。
DS Library Design	DS Library Design は、化学ライブラリ設計に特化した、類似性と多様性とを兼ね備えた完全なクラスタリング手法を備えたツール群です。パレート最適化手法により、化学ライブラリ設計内の複数の特性を最適化することができます。このパッケージのプロトコルはすべて、特定の研究プロジェクトに対して、最も効率のよい化学ライブラリとその化合物群を選択するように設計されています。

# Discovery Studio

## Life Science Modeling and Simulations

### ADMET and Predictive Toxicology

Product	Description
DS ADMET Descriptors	合成の候補やベンダーライブラリ、スクリーニングコレクションで得た分子の吸収、分布、代謝、排泄、毒性 (ADMET) の特性予測を算出することによって、化合物を早い段階で評価することができます。算出結果を用いると、合成の前に好ましくない ADMET 特性を持つ化合物を除外し、ADMET 特性向上のための分子設計に向けて構造を精密化して、評価することができます。医薬品開発の早い段階でこれらの特性を最適化することは、後の開発プロセスにおける ADMET の諸問題を軽減するために極めて重要です。DS ADMET には人間の腸内吸収、水溶解度、脳血管関門通過、血漿タンパク結合、チトクローム P450 2D6 阻害、肝毒性についてのモデルも含まれています。一連の低分子をフィルタし、SMARTS® ルールで指定したルールに適合する分子のみを選択します。
DS TOPKAT	実験や動物モデルによって化合物の性能を評価できます。化学物質の毒性の影響や、化学物質の環境に対する影響の評価を、分子構造だけを基にして算出し評価します。TOPKAT では交差検定された、強力な定量的構造毒性相関 (QSTR) モデルを使用して、さまざまな毒性の基準を評価し、特許取得済みの Optimal Predictive Space 法 (化合物が予測空間内にあることをチェックすることが可能) という検証方法を活用して結果の解釈に役立てます。



Accelrys Corporate Headquarters  
10188 Telesis Court, Suite 100  
San Diego, CA 92121-4779, USA  
Tel: +1 858 799 5000

Accelrys European Headquarters  
334 Cambridge Science Park  
Cambridge, CB4 0WN, UK  
Tel: +44 1223 228500

アクセルリス株式会社  
〒100-0013  
東京都千代田区霞が関3-7-1  
霞が関東急ビル17階  
Tel: 03-5532-3800