

Discovery Studio[®]

製品概要

最高峰の科学ソリューションの自由自在な組み合わせ - ターゲットの同定からリード化合物の最適化まで

Discovery Studio は、個別のニーズに合わせて研究ソリューションをカスタマイズすることができる無類の機能を提供します。

- 検証を受けた Discovery Studio の豊富な計算化学 / 生物学ツールから選択
- オープンでスケーラブルなプラットフォームを活用したプロセスの自動化、カスタム ワークフローの作成、およびデータ形式 / データベース / サードパーティ ツール / 社内ツールを統合
- 柔軟な展開オプション、ワークフロー共有機能、レポート作成ツールを使用して、個人とチームの両方の生産性を向上

個別のニーズに合わせてカスタマイズされた研究ソリューションを使用することで、可能性は無限に広がります。対象のシステムをさらに完全かつ徹底的に研究します。チームと一緒により効率的に作業します。これまでより自信を持って意思決定を行います。さらに研究を推進します。

信頼できる科学

Discovery Studio のグラフィカル インタフェースが提供する豊富なツール群 (表 1) を利用して、これまでになく容易に高分子 / 低分子の特性の検証、対象分子系の研究、リード化合物の同定、候補化合物の最適化を実行できます。さらに、Discovery Studio のツールは、検証を受けて公開されている科学アルゴリズムに基づいて構築されており、信頼性は十分です。Discovery Studio の中核を成す科学知識は、顧客、社内科学者、著名な科学アドバイザーなどの助言に基づく長年にわたる不断の技術革新によって確立されたものです。数百の研究論文で引用されている Discovery Studio は、業界をリードする多くの研究チームの信頼を得ています。

信頼性が高い Discovery Studio のツール (表 1)

- | | | |
|---------------------------------------|--|---|
| • 2D/3D の可視化 | • 構造ベースの設計、ドッキング、スコアリング | • 膜タンパク質モデリング |
| • 2D/3D の分子記述子 | • パーチャル スクリーニング、化合物ランキング / スコアリング | • ホモロジー モデリング |
| • 量子力学 / 分子力学計算 | • 受容体 - リガンド相互作用解析 | • 抗体モデリング |
| • SAR 分析、2D/3D QSAR | • フラグメントベース デザイン | • 静電場計算、タンパク質イオン化 / pK 予測 |
| • ベイズ統計、ニューラル ネットワーク、再帰分割、GFA など | • de novo デザイン (LUDI) | • タンパク質モデリング (MODELER [®])、解析、タンパク質工学 |
| • ライブラリ分析 | • ファーマコフォア (Catalyst [®]) | • タンパク質 - タンパク質のドッキングと精密化 |
| • ライブラリ設計 | • 母核変換 (scaffold hopping) | • 配列分析、配列アライメント、系統学的解析 |
| • ADME 予測と毒性予測 (TOPKA1 [®]) | • 3D データベース スクリーニング | • X 線 (CNX)、構造の精密化と解析 |
| • コンフォメーションの生成と分析 | • シミュレーション、分子力学 / 動力学 (CHARMm [®]) | |
| | • 溶媒和モデル | |

強力なプラットフォーム

Discovery Studio は、オープンでスケーラブルなアクセルリスのサイエンティフィック インフォマティクス プラットフォームの一部です。研究の在り方にあらゆるレベルで変化をもたらす、この強力なプラットフォームの機能群 (図 1、表 2) を使うと、次のようなことが実現できます。

- タンパク質配列や構造から、分子プロパティ、実験データまでのさまざまなデータを統合 / 処理し、同時に検討することで、的確な意思決定を実現できます。
- 社内プログラムコード、サードパーティのソフトウェア、パブリック データベース、内部データベースまで、必要なすべてのツールをこのプラットフォームに統合することで、作業環境を合理化し、リソースの使用を最適化します。
- タスクを自動化し、並列コンピューティングを活用することで、データを効率的に処理します。
- アルゴリズムのカスタマイズとワークフローの共有により、確実にベスト プラクティスを実行します (以下を参照)。

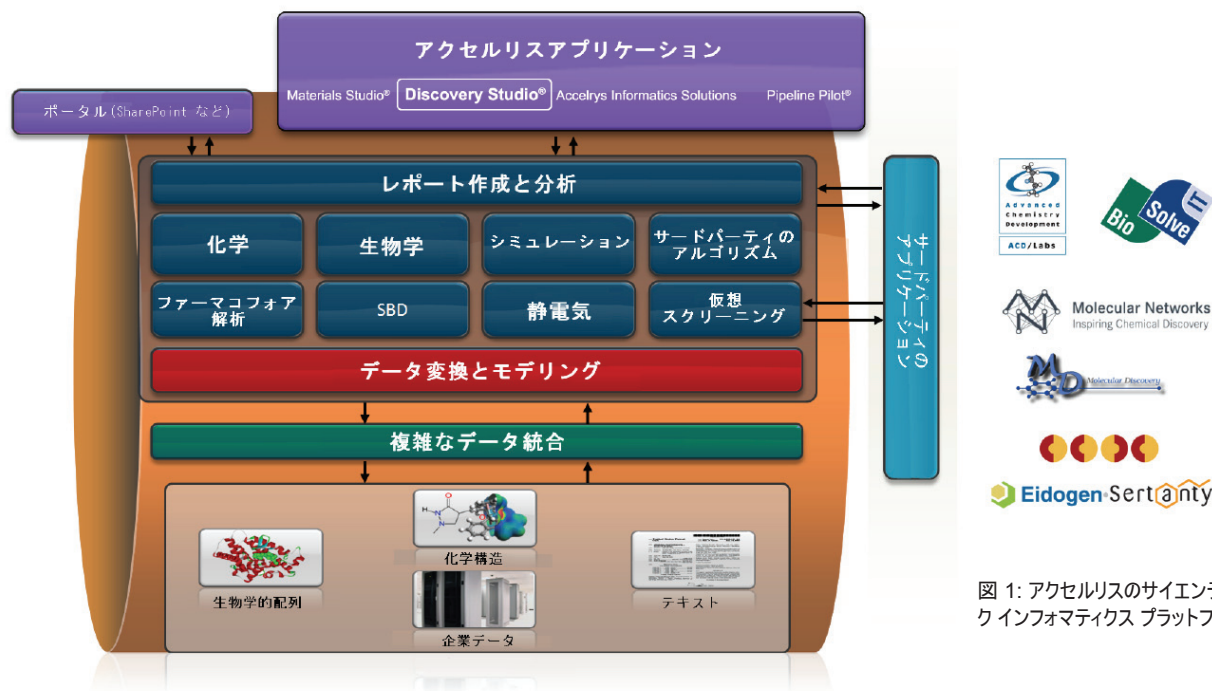


図 1: アクセルリスのサイエンティフィック インフォマティクス プラットフォーム

アクセリスのサイエンティフィック インフォマティクス プラットフォームのメリット (表 2)

- | | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> アルゴリズムとプロトコルのカスタマイズ タスクの自動化 (Perl スクリプトを使用) データ統合 (タンパク質配列、構造、分子特性、実験データなど) データ モデルの操作 (Perl スクリプトを使用) データベース アクセス (例: モデリング用の化学 / 生物学データを格納した社内ケムインフォマティクス データベース) | <ul style="list-style-type: none"> 社内 / 独自コードの統合 並列コンピューティング (グリッド、クラスター コンピューティング、マルチコア テクノロジーによる大規模タスクの迅速な処理) サードパーティ ソフトウェアの統合 Web リソースの統合 (例: PDB、PubChem) ワークフローの作成と共有 (コンポーネント化された科学ツールと簡単にグラフィカルなドラッグアンドドロップ プログラミングを使用) |
|---|--|

カスタマイズとコラボレーション

ユーザの熟練度や作業スタイルの違いにより、プロジェクトの進行が妨げられたり、目標を達成できなくなったり、リソースを利用できなくなることがよくあります。Discovery Studio のカスタマイズ / コラボレーション機能 (表 3) は、個々のユーザの操作性を向上するだけでなく、コミュニケーションとチームワークも強化します。Discovery Studio は Pipeline Pilot® Enterprise Server を使用するため、チームメンバーは、目的を共通化したワークフローを開発することで、容易に専門技術を共有し、共同作業によって結果を得、共通の目標に向かって努力できます (図 2)。



図 2: Discovery Studio は Pipeline Pilot Enterprise Server を使用するため、さまざまな役割を持つユーザのモデリング、自動化、意思決定、および共同作業を簡略化できます。

Discovery Studio のカスタマイズ機能とコラボレーション機能 (表 3)

- | | |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • アクセスとインターフェースのオプション (グラフィカルな Discovery Studio Client、スクリプトとプロトコルの共有環境、コマンドライン) • データの表示とカスタマイズのオプション (3D データをデータテーブルと一緒に表示、スクリプト / プロトコル コントロール) • 展開オプション (個人用のスタンドアローン ソリューション、エンタープライズ レベルのクライアント / サーバー インストールの一部) • レポート作成ツール、結果共有ツール | <ul style="list-style-type: none"> • タスクベースのワークフロー共有 (他のユーザの複雑なタスクベースの手順を誘導) • ユーザ コミュニティ (オンライン コラボレーション、スクリプト / プロトコルの共有、ユーザ グループ ミーティング) • ワークフローの作成 (コンポーネント化された科学ツールと簡単にグラフィカルなドラッグアンドドロップ プログラミングを使用) • ワークフローの共有 (社内 Web ページ、Microsoft® SharePoint® を使用) |
|---|---|

仕事の役割が何であっても、Discovery Studio を使用することにはメリットがあります (表 4、次のページ)。たとえば、コンピュータ エキスパートは、データと科学アルゴリズムを組み合わせることで有用なモデルを作成して可視化することができ、実験科学者と共有できます。実験科学者は、この情報を使用して有意な実験を設計し、プロジェクトをチームの目標に向かって前進させることができます。

ユーザ別の Discovery Studio のメリット (表 4)

生物学者	<ul style="list-style-type: none"> 配列 / 構造データ間の関係を例証する 高度な生物学データを別の分野の研究者とやり取りする
計算化学者	<ul style="list-style-type: none"> 検証を受けて長年信頼されてきたアクセルリスの科学ツールを適用し、新しいアルゴリズムやワークフローで補強する 結果と手法を幅広いユーザに公開する ワークフローを作成してカスタマイズし、一般的な手順としてアクセスできるようにする (図 3)
創薬化学者	<ul style="list-style-type: none"> プロジェクトにおいて重要な構造的情報を可視化する シンクロされた 2D/3D 作業環境を使用して包括的な低分子ライブラリを簡単に編成する (次ページの図 4) 生物学 / 化学実験データ間の複雑な関係を理解する
IT メンバー	<ul style="list-style-type: none"> 統合プラットフォームを使用することで、さまざまなベンダーからくるインストール、ライセンス、更新の要件の管理に必要な時間を短縮する 簡単でカスタマイズ可能なインターフェースを使用して、ユーザのトレーニングを簡素化する
プロジェクト マネージャ / プログラム マネージャ	<ul style="list-style-type: none"> 一貫したワークフローと手順を実装することによって時間を節約する チームメンバーに簡単に「全体像」とプロジェクト状態の更新情報を提供する 実証的手法を増やし、感覚的手法を減らすことで、プロジェクト内のコンセンサスを確立する

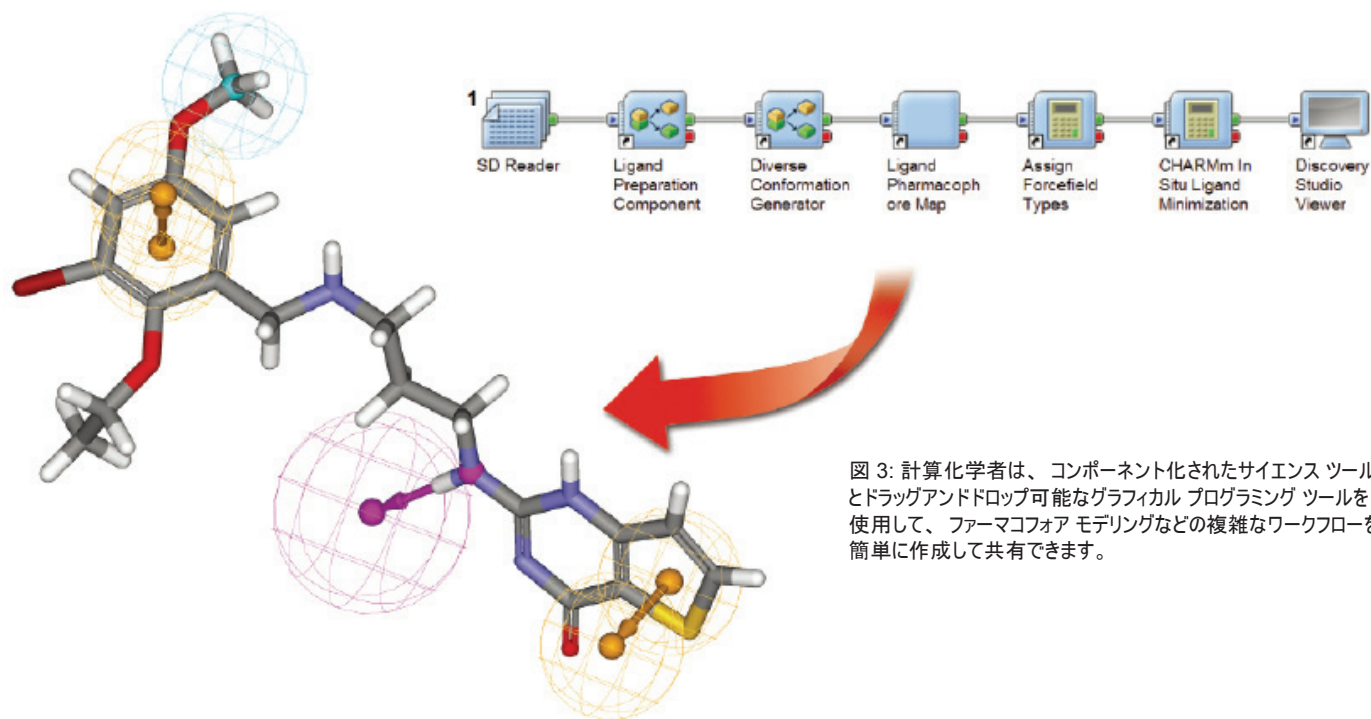


図 3: 計算化学者は、コンポーネント化されたサイエンス ツールとドラッグアンドドロップ可能なグラフィカル プログラミング ツールを使用して、ファーマコフォア モデリングなどの複雑なワークフローを簡単に作成して共有できます。

Compound Properties: C13H19NO2S 09/29/09

Property Name	Property Value
Molecular_Formula	C13H19NO2S
Name	C13H19NO2S

Relative_Energy	Status	3D View	Action
0	Mapped Correctly		Submit
0.0070406	Mapped Correctly		Submit
0.100682	Mapped Correctly		Submit

Receptor

図 4: 創薬化学者は、ユーザーフレンドリーな Web ベースのインタフェースから複雑な科学情報にアクセスし、2D と 3D の両方のデータを使用して、生物学 / 化学実験データ間の複雑な関係を簡単に可視化して探索できます。

ソフトウェアに加えて

アクセルリスは、万能型のソリューションだけではお客様が成功を収めるために十分でないことを知っています。Discovery Studio とアクセルリスのサイエンティフィック インフォマティクス プラットフォームが提供するメリットに加えて、アクセルリスは以下のようにお客様の成功を支援します。

- 傑出した顧客サポート – アクセルリスのお客様は、アクセルリス サポート チームに対して 98% の満足度を示しています。
- 技術革新への貢献 – アクセルリスは、100 人以上の博士号取得者を現場に配置し、産業界や学界で日々研究者と協力して、最先端のテクノロジーを提供することに努力しています。
- 科学コンサルティング – アクセルリスは、創薬のための科学ソリューションを提供するために技術と経験を有する数十人の博士号取得者を擁しています。それがモデリング実験の実施や、オーダーメイドソリューションの作成など、お客様が必要とするあらゆる方法で短期的に支援を行うための準備をこれらのスタッフは整えています。

詳細

オンライン問い合わせフォームに記入していただければ、アクセルリスの担当者が折返し連絡させていただきます。Discovery Studio とアクセルリスのサイエンティフィック インフォマティクス プラットフォームがお客様の研究をどのように支援できるかについてご説明いたします。

<http://accelrys.com/company/contact/>



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