

# DISCOVERY STUDIO<sup>®</sup> VISUALIZER 3.1

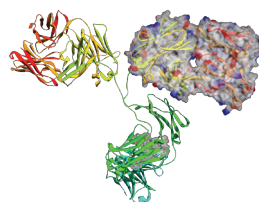
タンパク質や低分子のデータを可視化、共有し、解析するための商用レベルの3D分子可視化ツールを必要とされているのであれば、Discovery Studio Visualizer (DS Visualizer) が広範な機能を無償でご提供いたします。

DS Visualizer は、低分子用、高分子用両アプリケーションに対する、無償で機能豊富な分子モデリング環境です。全ての機能を備えたエキスパート向けモデリング製品である、最新リリースの Discovery Studio 3.1 を基に構築され、かつ完全互換であることから、エキスパートとその共同研究者が、時間や科学的情報をロスする事無く、効果的かつシームレスに計算結果を交換できます。

## DISCOVERY STUDIO VISUALIZER

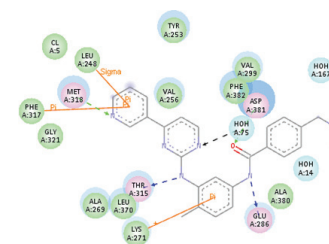
ライセンス無しで、Discovery Studio Visualizer (DS Visualizer) を使用する場合、次の機能ご利用頂けます。

- ・ 可視化:
  - 高度な分子可視化
  - 刊行物レベルのグラフィックス
  - ハードウェアによる高速化と立体視のサポート†
- ・ 高分子設計:
  - 複数ドメインからなるタンパク質配列の表示と編集(例、抗体)
  - 二次構造予測
  - タンパク質構造の重ね合わせと編集
- ・ リガンドベースの設計:
  - スケッチおよびフラグメント構築のツール
  - 手作業によるファーマコフォア生成
  - リガンドのフレキシブルな重ね合わせ



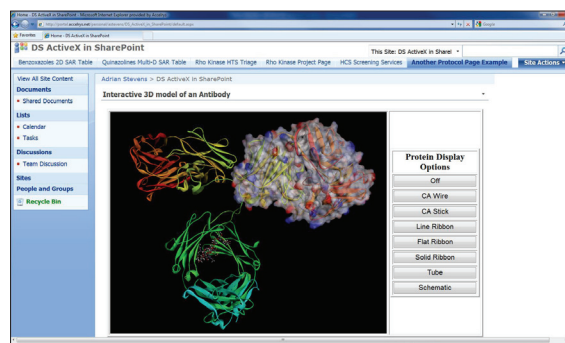
- ・ タンパク質構造ベースの設計:

- リガンド結合部位の定義、表示、および編集
- 2次元のリガンド-受容体相互作用図の作成
- 重要な水素結合、 $\pi$ - $\pi$ 、カチオン- $\pi$ 、及び $\sigma$ - $\pi$ 相互作用の表示



- ・ 共有と共同研究:

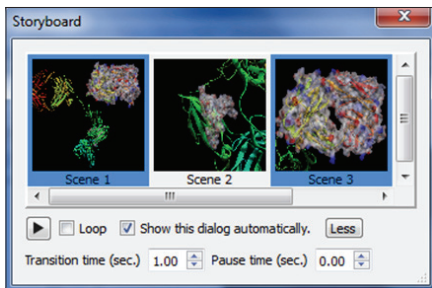
- Microsoft Office<sup>®</sup> やウェブページ中での分子の立体表示 (ActiveX Control)
- Storyboard による表示画面の記録や共有
- 2次元および3次元のグラフ、ヒートマップ等の作成



## DS VISUALIZER 3.1 の新機能

最新リリースの Discovery Studio Visualizer には、多数の新たな機能強化がなされています。

- Storyboard による再生と切替時間の設定: Storyboard により、切替時間や静止時間を設定した上で動画を再生できるようになりました。Storyboard を含む .dsv ファイルを開く際、自動的にダイアログが開くよう設定することも可能です。



- 動画として出力: Storyboard を .webM 形式の動画として出力できるようになりました。
- html 形式への保存: 分子の立体表示を直接 html ファイルに保存できます。容易に共有したり、ウェブサイトや Microsoft™ SharePoint™ にアップロードできます。
- PPT スライドへの保存: 分子の立体表示を直接 Microsoft PowerPoint™ スライドに保存することにより、容易にプレゼンテーション資料を作成する事ができます。

## 改訂! DS3.1 ACTIVEX CONTROL

DS ActiveX Control は、無償のプラグインであり、低分子やタンパク質、核酸、結晶構造やファーマコフォアモデルを立体的に表示し、操作する環境を提供します。このウェブツールは完全に改訂され、更新されました。新たな機能は以下の通りです。

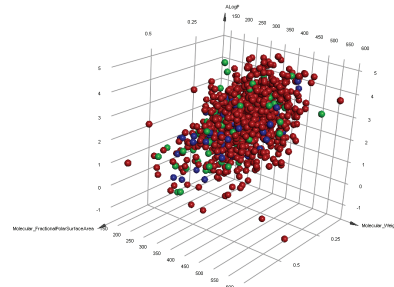
- Storyboard のサポート: 切替時間の設定や自動再生など、全ての機能を含んでいます。
- DSV ファイルのサポート: 最新リリースの Accelrys DSV ファイルフォーマットを完全にサポートするようになりました。
- グラフィックスのサポート: 最新の機能強化である深度ぼかしや陰影付けもサポートします。

\* DS ActiveX Control は単品の製品であり、DS Visualizer と共に、別途無料でダウンロードできます。  
DS Visualizer をインストールしなくても使用できます。

## 分子の可視化

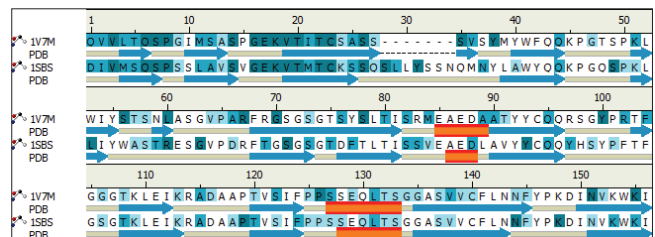
DS Visualizer には生物学的データおよび化学的データの可視化、分析、共有機能があります。データを 3D 構造、配列、データ表として表示するオプションが用意されており、分子データを複数の視点で見ることができます。

- 分子の可視化やデータ表の表示、およびデータの階層構造表示をサポートする分子ウィンドウを使用することにより、データにアクセスしてすばやく分析することができます。
- 原子レベルから大型の高分子複合体に至る分子の立体構造を、刊行物レベルで表示したり操作したりできます。
- 3D ポイントプロット、ヒートマップ、Ramachandran プロットなど、さまざまなグラフを作成し、データを分析できます。
- ナビゲーションキーを使って一連の分子をスクロールすること



で、複雑なライブラリを簡単に管理できます。

- 分子ウィンドウに組み込まれているブラウザを使用して、大きなデータを簡単に管理できます。構造を可視化する際には、対象の物性によって色分け表示できます。
- 複数鎖を持つタンパク質や核酸を配列ウィンドウで表示できます。配列と構造の比較やアノテーション、配列相動性の解析を行うために、配列やアラインメントを表示できます。



### サポートするオペレーティングシステム†

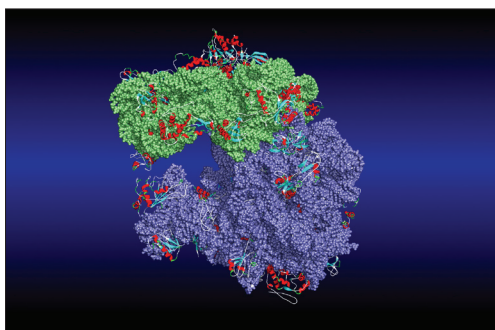
Windows および Linux 互換:

- Windows: XP, Vista (32 ビット), Windows 7 (64 ビット)
- Linux: Red Hat 4 (32/64ビット), Red Hat 5 (64ビット), SUSE 10, 11 (64ビット)

### 表示と画像出力

DS Visualizer では、高品質の画像をスライドショー、ポスターなど、あらゆる表示形式で出力できます。

- グラフィックスの性能: 高度なハードウェアアクセラレーションを活用することにより、非常に大きな高分子システムの操作性が向上しました。
- 陰影と深度のぼかし: 光源指定による、またはアンビエントな陰影、深度のぼかし、原子の等高線、自由な背景を利用できます。
- 照明、奥行き表現、画像品質をコントロールし、見栄えを良くすることができます。
- 3D 構造表示に裏表のもしくは表面のみのサーフェスを加え、材質の外観(金属、プラスチックなど)を適用することにより、プレゼンテーションにすぐに使える洗練されたプロ仕様の画像を作成できます。
- jpg、jpeg、.bmp、.png ファイルにエクスポート
- 高品質の 3D 画像を POV-Ray ファイルとして保存



### サポートするグラフィックカード†

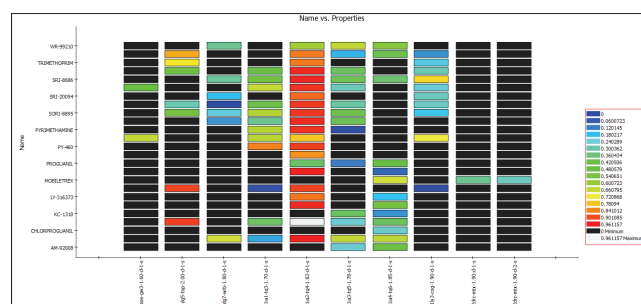
DS3.1 および DS Visualizer 3.1 では、次のグラフィックカードをサポートしています:

- ATI FireGL V3600、V5600、V7600[St]、V7700[St]、V8600[St]
- ATI FirePro V3800、V5800、V8700[St]
- NVidia Quadro FX 570、580、1800、3800[St]、4600[St]、4700[St]、4800[St]、5600[St]、5800[St]

### 構造のインポート、作成、分析

DS Visualizer は、二次元および立体構造を含むさまざまなデータタイプを扱うことができます。構造や配列を PDB や NCBI から直接ダウンロードすることも可能です。

- スケッチおよびフラグメント構築ツールを使用して立体構造をスケッチ、作成、変更できます。
- 原子同士の対応付け、残基や配列のアラインメントに基づく構造重ね合わせを実施できます。
- 疎水性基や水素結合ドナー、アクセプター、芳香環等の特徴を可視化するためにファーマコフォアモデルを構築できます。
- 小分子またはタンパク質-リガンド複合体から、ファーマコフォアモデルを手作業で生成できます。
- 大きな分子セットの物性をユーザー定義のカラースキームで可視化します。
- 分子データを 3D 構造、配列、図やグラフ、データ表といった複数の視点で表示します。
- 対話型の環境中で分子の位置や化学構造を改変し、構造の配置や相互作用をモニターできます。
- 単一の環境で溶媒露出度や RMSD を計算し、二次構造を予測します。



### カスタマイズ

DS Visualizer はワークフローに合わせてカスタマイズできます。

- ツールバーやボタン、ショートカットキーを追加できます。
- ドッキング可能なウィンドウを自動的に隠して、可視化作業のための作業スペースを最大化できます。
- デスクトップやファイル・エクスプローラーから、ファイルをドラッグ & ドロップできます。
- Perl スクリプトを使用して共通のワークフローを自動化できます。

† 詳細は、次の URL でご覧いただけます。 [accelrys.com/products/discovery-studio/requirements/technical-requirements-310.html](http://accelrys.com/products/discovery-studio/requirements/technical-requirements-310.html)

## DISCOVERY STUDIO 3.1 VISUALIZER: 無償および有償モード

- 無償版: 無償モードでは、有償モードの Discovery Studio の機能のうち、一部を利用することが可能です。例えば、分子の構造や配列アラインメントの表示および編集だけでなく、基本的な分子重ね合わせも実施可能です。DS Perl API の subset を用いて、タスクの自動化もできます。
- 有償版: ライセンスをインストールすることにより、有償モードの DS Visualizer client としてご利用頂けます。

- 既存の Pipeline Pilot™ サーバへ接続できます。
- Pipeline Pilot で利用可能な Discovery Studio のプロトコルにアクセスする事で、タンパク質のデザインや解析、構造ベースのデザイン、ファーマコフォアモデリング、ADMET 予測やシミュレーション等を実施できます。
- プロトコルの表示やカスタマイズ、同僚との共有、実行を Discovery Studio や Pipeline Pilot クライアントで行えます。

Discovery Studioの詳細については、下記URLをご参照下さい。  
<http://accelrys.co.jp/products/discovery-studio/>

タイプ	機能	無償版	有償版
クライアント	Windows 7、Vista、XP および Red Hat Linux 4.0、5.0、SUSE 10 でサポート (新機能)	✓	✓
	ファイルや情報にすばやくアクセスできる初期ページ	✓	✓
	カスタムのショートカットキーとツールバー	✓	✓
	Perl スクリプト	✓	✓
	ファイルのエクスプローラ表示	✓	✓
	小規模な分子データシート向けの表ブラウザ	✓	✓
	プロトコル、ジョブ、パラメータヘルプ、ツールのエクスプローラ表示	✓	✓
全般	3D 表示と、それに関連する階層およびデータ表の表示を備えた、統合分子ウィンドウ	✓	✓
	分子の可視化を拡張する裏面両面および表面のみのサーフェスの作成	✓	✓
	2D (線および点) グラフ、3D 点、グラフ、ヒートマップ、ヒストグラムなどのグラフへのアクセス (新機能)	✓	✓
	分子シミュレーションで使用するパラメータとトポロジファイルを生成するための力場アサイン (新機能)	✓	✓
	分子シミュレーション用の拘束条件の設定 (新機能)	✓	✓
	分子動力学シミュレーション†	✓	✓
	原子同士の対応付け、残基、配列アラインメントに基づく構造の重ね合わせ (新機能)	✓	✓
	分子オーバーレイ機能に基づく構造の重ね合わせ	✓	✓
	RMS 計算	✓	✓
	変換マトリックスと構造中心の計算	✓	✓
	基本的な分子物性の計算 (新機能)	✓	✓
	ツールバーからのプロトコルの起動†	✓	✓
	タンパク質	ペプチドおよび核酸用の Molecular Builders (新機能)	✓
側鎖ロータマー構造および相互作用分析へのアクセス (新機能)		✓	✓
アラインメントによる構造の重ね合わせ (新機能)		✓	✓
構造と配列のアラインメント†		✓	✓
多様な配列-構造フォーマットのサポート		✓	✓
配列ウィンドウ		✓	✓
二次構造予測		✓	✓
Ramachandran や Contact Plot などのグラフ作成機能 (新機能)		✓	✓
X 線電子密度マップの形成と表示		✓	✓
構造をナビゲートし 3D ラベルを付けるための、3D ポインタ (新機能)		✓	✓
X 線構造の編集用基本ツール (新機能)		✓	✓
X 線構造の作成と調整		✓	✓
X 線リガンド構造の配置と調整		✓	✓
デンドログラムツールバー	✓	✓	
タンパク質構造の準備・最小化・調整、タンパク質レポートの作成、タンパク質構造の検証を実行するためのプロトコルへのアクセス†	✓	✓	
リガンド設計	化学的構造の 2 次元表示	✓	✓
	3D 分子スケッチ	✓	✓
	予め用意されたフラグメントが収められているツールパネルを利用した、3D 小分子の作成や変更 (新機能)	✓	✓
	エネルギー計算に先立って分子を準備するための原子の分類 (新機能)	✓	✓
	ツールパネルを使用した Dreiding 最小化、座標の変更、ねじれの変更によるコンフォメーションの調整	✓	✓
	RMSD、近接、水素結合に基づく分子の動的トラジェクトリの分析	✓	✓
	CHARMM 力場を使用した分子エネルギーの計算とエネルギー最小化の実行†	✓	✓
	複合体の分析 (新機能)	✓	✓
	$\pi$ - $\pi$ 、カチオン- $\pi$ 、 $\sigma$ - $\pi$ 相互作用モニター	✓	✓
	2D 受容体-リガンド相互作用図の生成 (新機能)	✓	✓
	リガンド結合部位の定義、表示、編集 (新機能)	✓	✓
	ファーマコフォア (Catalyst) クエリの手動生成	✓	✓
	ファーマコフォアモデルの自動生成と分析	✓	✓

† 注意: プロトコルの実行にはアクセルリスより製品ライセンスを追加する必要があります。