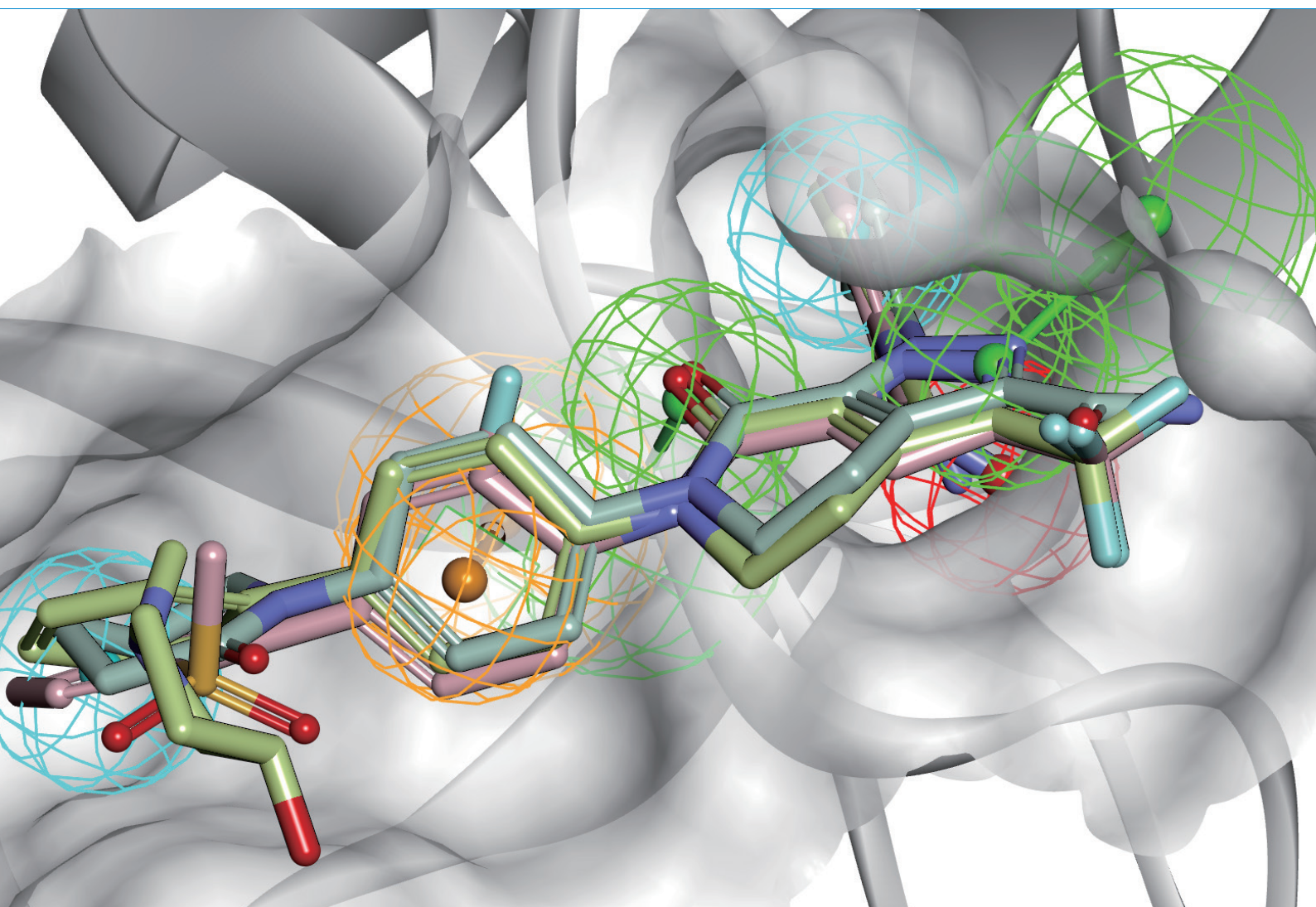


BIOVIA DISCOVERY STUDIO

分子表示 / 解析ツール

製品カタログ



最新の計算化学手法に
アクセスできる
分子モデリングツール

BIOVIA Discovery Studio は様々な最新の計算化学手法にアクセスできる分子モデリングツールですが、メディシナルケミストなど、ソフトウェアになじみが薄い研究者にも直観的に操作して頂けるよう、使いやすく柔軟なインターフェースを備えています。タンパク質や低分子のデータを可視化、解析し、それらを資料としてまとめ、共有する為にどうぞ BIOVIA Discovery Studio をご活用下さい。

BIOVIA DISCOVERY STUDIO は、低分子医薬およびバイオ医薬をデザインするための、最も充実したモデリング・シミュレーションソフトウェアです。

高い信頼性

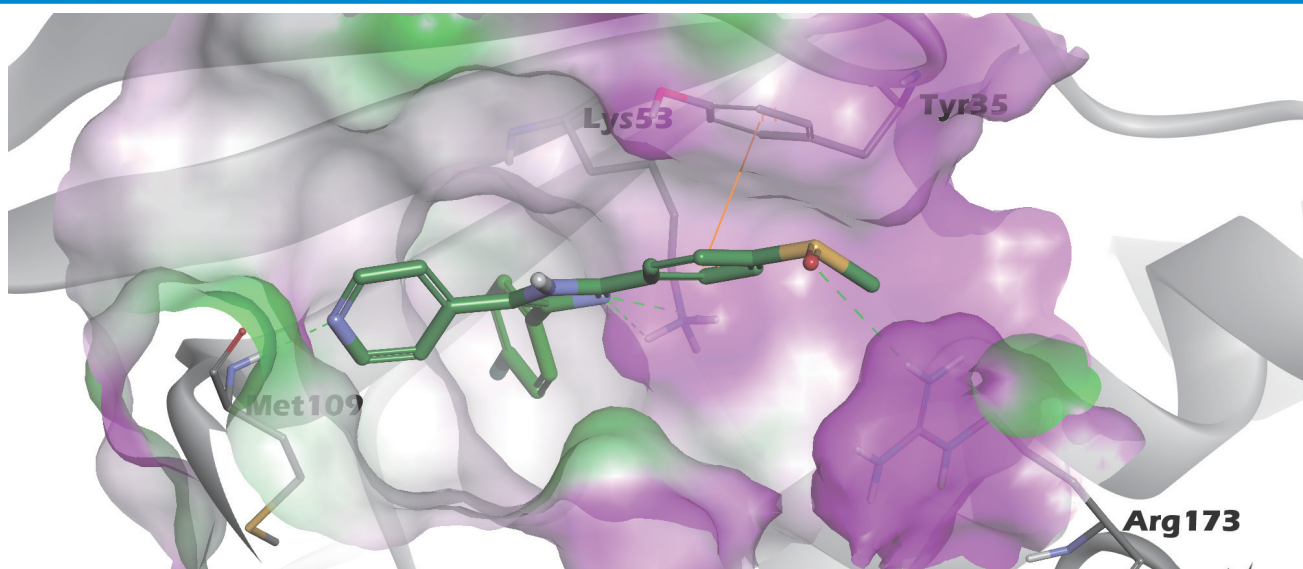
BIOVIA Discovery Studio に搭載されているモジュールは、これまで世界中の研究者によって検証され、さらに BIOVIA 社内でも十分に検証された信頼のおけるものばかりです。例えば MODELER はタンパク質構造予測コンテスト CASP において上位グループの多くが利用しています。

使いやすいインターフェース

BIOVIA Discovery Studio のインターフェースは、ツールを基準ではなく、「何の解析がしたいか」を基準にデザインされていますので、解析ツールに詳しくない方でも容易に解析を実行できます。また、Windows、Linux で同じインターフェースから利用することができます。

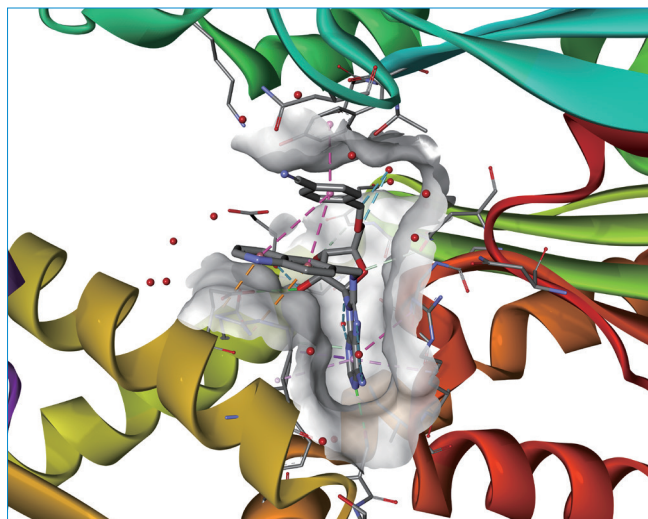
柔軟な拡張性

BIOVIA Discovery Studio の中核では、非常に拡張性の高い BIOVIA Pipeline Pilot の技術が用いられています。これによりユーザーは、解析プロトコルを自由に改変したり、また他社のソフトウェアを組み込んで利用することも可能となります。



立体分子可視化

BIOVIA Discovery Studio Visualizer上でタンパク質立体構造、アミノ酸配列、化合物テーブル、プロット等を表示し、各種解析ツールを起動することができます。



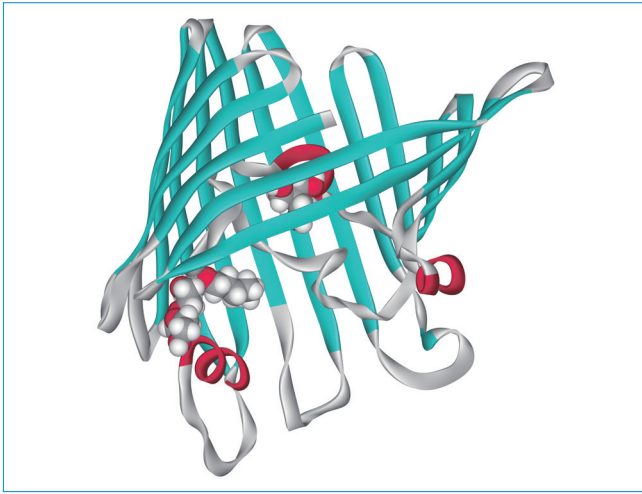
配列解析

遺伝子、ゲノム配列の情報から、データベース検索を実行したり、機能予測を行うことが可能です。



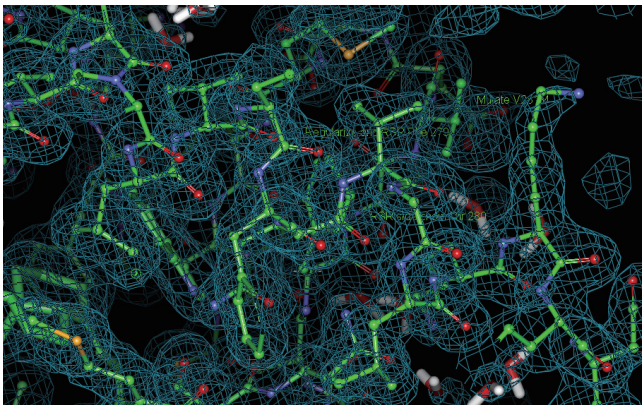
ホモロジーモデリングシミュレーション

既知の立体構造情報を利用して、アミノ酸配列から未知タンパク構造のモデルを構築します。また分子力学 / 動力学シミュレーションを行うことにより、タンパク質の挙動を解析できます。



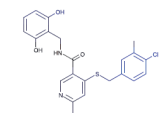










X線結晶構造解析

タンパク質およびタンパク質-リガンド結合物の構造を得るために、結晶の X 線散乱データから電子密度マップを作成、実際の三次元立体構造モデルを構築します。



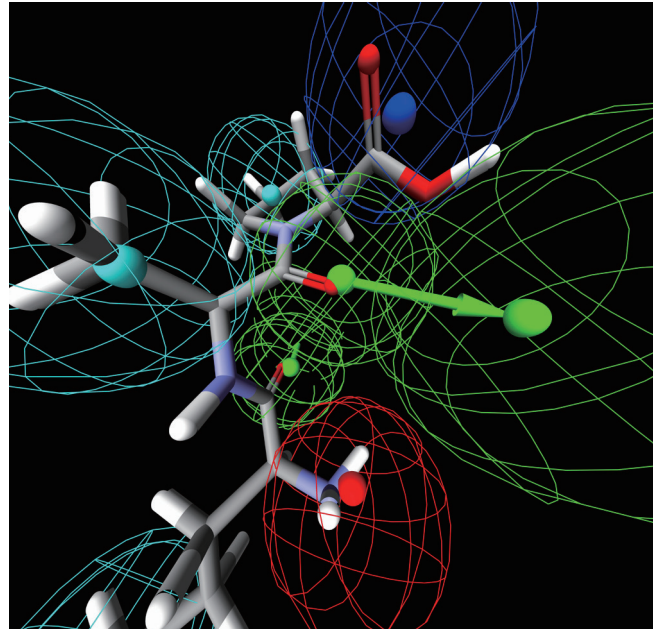
QSAR、ADME / TOX

分子の構造上の特徴を数値化し、既知のリガンド分子の値から予測モデルを構築することが可能です。また構築済みのモデルを用いて、薬物体内動態(ADME)、毒性(Tox)の予測を行うことも可能です。

Molecule_1	TOPKAT_Ames_Mutagenicity																										
 <chem>C20H21ClN2O5S</chem> Molecular Weight: 428.93173 MolLogP: 4.545 Rotatable Bonds: 6 Acceptors: 5 Donors: 3	Structural Similar Compounds																										
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>GLYBURIDE</th> <th>303-47-9</th> <th>Ochratoxin A</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Structure</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Actual Endpoint</td> <td>Non-Mutagen</td> <td>Non-Mutagen</td> <td>Non-Mutagen</td> </tr> <tr> <td>Predicted Endpoint</td> <td>Non-Mutagen</td> <td>Non-Mutagen</td> <td>Non-Mutagen</td> </tr> <tr> <td>Distance</td> <td>0.586</td> <td>0.586</td> <td>0.586</td> </tr> <tr> <td>Reference</td> <td>FDR 1104</td> <td>US Environmental Protection Agency of (http://www.epa.gov/NCCT/obstovstf_descan_extema.html)</td> <td>EMC</td> </tr> </tbody> </table>	Name	GLYBURIDE	303-47-9	Ochratoxin A	Structure				Actual Endpoint	Non-Mutagen	Non-Mutagen	Non-Mutagen	Predicted Endpoint	Non-Mutagen	Non-Mutagen	Non-Mutagen	Distance	0.586	0.586	0.586	Reference	FDR 1104	US Environmental Protection Agency of (http://www.epa.gov/NCCT/obstovstf_descan_extema.html)	EMC	Model Applicability	
Name	GLYBURIDE	303-47-9	Ochratoxin A																								
Structure																											
Actual Endpoint	Non-Mutagen	Non-Mutagen	Non-Mutagen																								
Predicted Endpoint	Non-Mutagen	Non-Mutagen	Non-Mutagen																								
Distance	0.586	0.586	0.586																								
Reference	FDR 1104	US Environmental Protection Agency of (http://www.epa.gov/NCCT/obstovstf_descan_extema.html)	EMC																								
Prediction: Non-Mutagen Probability: 0.372 Enrichment: 0.667 Bayesian Score: -10.209 Mahalanobis Distance: 9.743 Mahalanobis Distance p-value: 0.455	Prediction: Positive if the Bayesian score is above the estimated best cutoff value from minimizing the false positive and false negative. The estimated probability that the sample is in the positive category. This assumes that the Bayesian score follows a normal distribution and is different from the prediction using a cutoff. Enrichment: An estimate of enrichment, equal to the normalized Bayesoid (minus random) of this sample being in the category. Bayesian Score: The standard Levenshtein-weighted Bayesian score. Mahalanobis Distance: The Mahalanobis distance (MD) is the distance to the center of the training data. The larger the MD, the less conforming the prediction. Mahalanobis Distance p-value: The p-value gives the fraction of training data with an MD greater than or equal to the one for the given sample, assuming normally distributed data. The smaller the p-value, the less likely by the prediction. (For right-tail point of X properties (e.g., fingerprints), the MD p-value is widely known.)																										
Feature Contribution																											
Top features for positive contribution																											
Fingerprint	Bit Smiles	Feature Structure	Score																								
SCFP_12	1575781215		0.517																								
			Mutagen in training set: 16 out of 16																								

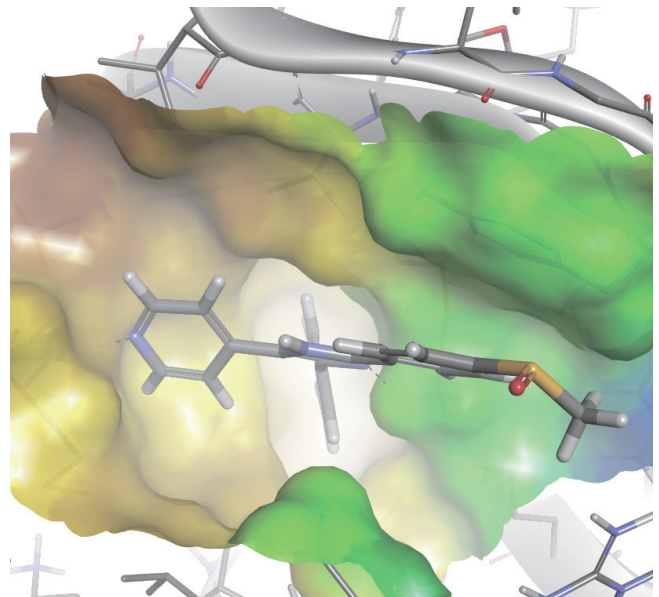
ファーマコフォアモデリング

既知の活性リガンド化合物の情報から、リガンド-タンパク質の結合様式(水素結合ドナー・アクセプター、極性等)を三次元空間上に配置したファーマコフォアモデルを作成し、親和性評価、データベース検索等を行うことが可能です。



ドッキングシミュレーション・ドラッグデザイン

タンパク-リガンド分子のドッキングシミュレーションを行い、得られた結合構造に対して適切なスコアリングを行います。また、まったく新規の(de novo)リガンド分子を、化合物のフラグメントライブラリから構築する機能もあります。




BIOVIA DISCOVERY STUDIO VISUALIZER

閲覧専用のビューを無料で配布しています。

▼ モジュール名	▼ 主な機能
Protein Modeling and Sequence Analysis : タンパク質モデリングおよび配列解析	
BIOVIA Discovery Studio SEQUENCE ANALYSIS	BLAST あるいは PSIBLAST を用い、興味のあるアミノ酸配列についてローカルデータベースあるいは NCBI の WEB サーバに対して検索を行い、相溶性のある配列を探します。また、系統樹の描画、Evolutionaly Trace 解析を行い、タンパク質の機能に対して重要な残基を推定します。
BIOVIA Discovery Studio PROTEIN FAMILIES	配列と構造情報を用いて、複数のアミノ酸配列からマルチプルアライメントを行います。またアライメント結果から進化系統解析を行います。
BIOVIA Discovery Studio MODELER	自動ホモロジーモデリング、ループのモデリング、アミノ酸配列の構造に対するアライメント、タンパク質のミュータントの構築を行います。
BIOVIA Discovery Studio PROTEIN REFINE	CHARMm のテクノロジーを用いて、タンパク質の側鎖、ループ領域の最適構造を発生させます。
BIOVIA Discovery Studio PROTEIN HEALTH	Profiles-3D のアルゴリズムを用いて、タンパク質構造の評価を行い、構造が適正かどうかを評価する指標を与えます。
BIOVIA Discovery Studio PROTEIN DOCKING	ZDOCK および RDOCK アルゴリズムを用いて、タンパク質-タンパク質相互作用を迅速かつ正確に予測することができます。
BIOVIA Discovery Studio PROTEIN AGGREGATION	タンパク質上の凝集しやすい部位の大きさと場所を特定することで、安定性向上につながる変異導入箇所を予測できます。また、凝集性向による複数のタンパク質のランク付けも可能です。
Biopolymer Building and Analysis : 生体高分子の構築	
BIOVIA Discovery Studio BIOPOLYMER	タンパク質、ペプチド、DNA、RNA 等の生体高分子のモデルを簡単に構築し、コンピュータ上で取り扱うことができます。また、静電ポテンシャルおよび溶媒和エネルギーを計算することも可能です。
Simulations : シミュレーション	
BIOVIA Discovery Studio CHARMM	非常によく検証された、タンパク質および複合体のシミュレーションエンジンです。
BIOVIA Discovery Studio CFF	非常に広範囲 (タンパク質、核酸、脂質、炭水化物、低分子化合物) の分子に対応可能な非常に精度の高い力場 (force field) です。CHARMm で利用することが可能。
BIOVIA Discovery Studio MMFF	高く評価されている Merck Molecular 力場です。
BIOVIA Discovery Studio ANALYSIS	トラジェクトリーファイルの情報を解析、可視化します。RMSD 計算、close-contact、水素結合数の解析をドッキング結果に対して実行することも可能です。
BIOVIA Discovery Studio QUANTUMm	密度汎関数法である DS DMOL ³ Molecular(QM) と CHARMM(MM) を組み合わせた、正確な QM/MM の手法を用いることで、高い精度でタンパク質-リガンド間相互作用をモデル化できます。
Receptor-Ligand Interactions : タンパク質受容体-リガンドの相互作用	
BIOVIA Discovery Studio LIBDOCK	標的タンパク質の活性部位にリガンドをドッキングさせます。
BIOVIA Discovery Studio LIGANDSCORE	検証済みのデータセットを用いて構築されたスコアリングファンクションにより、リガンド-タンパク質の相互作用を評価します。
BIOVIA Discovery Studio LUDI	タンパク質の活性部位の構造的、化学的特徴を元にして、リード化合物を de novo デザインするためのツールです。
BIOVIA Discovery Studio DE NOVO EVOLUTION	DS Ludi における de novo ドラッグデザインの過程を自動化するツールです。
BIOVIA Discovery Studio ANALYSIS	ドッキングシミュレーションの結果から、RMSD を可視化したり、close contact、水素結合数の解析を高速に実施します。
BIOVIA Discovery Studio CHARMM LITE	CHARMm の幅広い機能のうち、ドッキング結果の最適化 (リガンド構造をレセプターの一部の原子を含めて最適化) のみの機能に限定したバージョンです。
BIOVIA Materials Studio Mesocite FLEXIBLE DOCKING	活性サイト内の側鎖のコンフォメーション変化を考慮に入れたドッキングが可能です。
Pharmacophore Modeling and 3D Database Management : ファーマコフォア (薬理活性集団) モデリングおよび 3D データベース解析	
BIOVIA Discovery Studio CATALYST HYPOTHESIS	低分子化合物の、ターゲット生体高分子に対する結合親和性に関する一般化された特性について、詳細な根拠に基づく包括的なファーマコフォア仮説を作成します。
BIOVIA Discovery Studio CATALYST CONFORMATION	化合物が取りうる 3D コンフォメーションを網羅的に構築するモジュールです。
BIOVIA Discovery Studio CATALYST SHAPE	分子を 3 次元構造で表現し、類似の分子形状を持つ体積分子を識別します。
BIOVIA Discovery Studio CATALYST SCORE	それぞれの化合物に対し、適合性、活性のスコアを計算します。
BIOVIA Discovery Studio CATALYST BUILD & DS CATALYST SEARCH	化合物の構造データベースを独自に構築し、多種多様なオプションを用いて検索することが可能です。
ADMET Descriptors : 薬物体内動態解析	
BIOVIA Discovery Studio ADMET	体内における吸収、分布、代謝、排出、および毒性といった、薬物体内動態 (ADMET) を予測することにより、合成化合物の検討や市販ライブラリの導入、スクリーニングにおいて有用な情報を得ることができます。
Predictive Toxicology (TOPKAT) : 毒性予測	
BIOVIA Discovery Studio TOPKAT	化合物の構造情報のみから、毒性および環境への影響を予測することが可能です。
Visualization : ビジュアライゼーション、ユーザーインターフェース	
BIOVIA Discovery Studio STANDALONE	BIOVIA Discovery Studio のモジュール群の統合環境として、生体高分子、化合物のデータを可視化、解析を行い、その結果を他の研究者と共有することができる、非常に使いやすいユーザーインターフェースです。ネットワーク上の解析サーバにアクセスし、それぞれの研究領域における解析プロトコルを実行可能です。さらに、BIOVIA Pipeline Pilot を用いて作成された独自の解析プログラム、解析プロトコルにアクセスすることも可能です。
BIOVIA Discovery Studio CLIENT	タンパク質および低分子化合物のデータについて、非常に高精度なグラフィックスで可視化、解析、結果の共有を行うことができます。(BIOVIA Discovery Studio のモジュールを利用するためには、BIOVIA Pipeline Pilot サーバが必要となります)
BIOVIA Discovery Studio VISUALIZER (無料)	様々なファイルフォーマットに対応した、タンパク質および低分子化合物のための高品質な 3D ビューワーです。計算科学者が解析した結果を実験科学者が参照する場合などに非常に便利です。
Protocol creation, customize : プロトコル構築、カスタマイズ	
BIOVIA PIPELINE PILOT	バイオインフォマティクス、ケムインフォマティクス、モデリングシミュレーションをカバーする、ライフサイエンスのための解析プロトコル構築ツール。BIOVIA Discovery Studio から利用する解析プロトコルを構築するほか、大規模なインフォマティクスシステム、WEB インターフェースのシステム構築も容易に行うことも可能です。さらに、ユーザー独自のツールを組み込んで利用することも可能です。

ダッソー・システムズの 3D エクスペリエンス・プラットフォームでは、11 の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3D エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは 140 カ国以上、あらゆる規模、業種の約 19 万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語) をご参照ください。

