

バイオインフォマティクス・化合物情報解析のための
新世代エンタープライズソフトウェアの機能と解析事例 1
アクセルリス株式会社・道賀 康祐

創薬インフォマティクスツール、PipelinePilot は、以下の特徴を持つ。

- 計算機の専門家ではない研究者が、様々なツールを組み合わせで解析可能である。
- バイオインフォ、ケムインフォから、タンパク質構造、ドラッグデザイン、統計解析、画像情報処理、文献情報処理まで、幅広いツールが提供されている。
- 動的なレポート作成、WEB インターフェースからの利用を簡単に行うことができ、研究グループ内の情報とノウハウを有効活用することができる。

創薬、新薬開発の過程においては、大量の化合物、配列情報を駆使して研究を進めることが求められる。アクセルリスの PipelinePilot は、世界中の製薬企業で用いられている創薬インフォマティクスのためのソフトウェアである。ユーザーはコンポーネント化されている解析ツールを自由自在に組み合わせ、化合物ライブラリの構築や、バーチャルスクリーニング、大量の配列解析などを簡単に行うことができる。また、ユーザーが独自に作成したソフトウェア、別途入手したソフトウェアについても容易にコンポーネント化が可能であり、PipelinePilot 上で組み合わせで利用することができる。作成した解析コンポーネント、解析プロトコルは共有して利用することが可能であるため、それぞれの研究者が蓄積した解析ノウハウを研究グループ内で有効に活用することができる。

PipelinePilot で利用可能なコンポーネントは、配列解析、化合物構造情報解析、タンパク質構造、ドラッグデザインツールから、画像情報、文献情報といった幅広い分野のものが提供されており、これまで組み合わせで利用することが難しかったツール群をコンピューターの専門家ではない研究者が自由に組み合わせで研究を進めることができる。その他 PipelinePilot には各種統計ツールやレポート作成ツール、WEB インターフェースが搭載されており、研究グループ内で蓄積されたデータやツールを総合的に閲覧、利用することが可能である。