

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 2
サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社・福島 信弘

アクセルリス社製SciTegic Enterprise Server™ (PipelinePilot) は、様々な機能別部品であるコンポーネントを組み合わせ、データ収集、統計的解析、配列解析、化合物ライブラリー処理、ADMET予測、レポート生成等の処理のためのプロトコルを作成し、自動的に且つ効率的にデータ処理や計算を行うことができます。取り扱うことができるデータは、単純な数値、文字だけではなく、画像や報告書などの文書、分析・測定機器のデータなど、広範囲の分野に渡ります。

本セミナーでは解析事例として

- Sequence Analysis を使用した配列解析
- インターネットからの情報の自動収集
- 分析データの管理
- 化合物データの自動処理

等を紹介いたします。

また、Sequence Analysis や外部アプリケーションとの連携、PipelinePilot Webport によるインターフェースなどの各種機能を統合した事例として、薬学グリッドによるバイオインフォマティクスシステムをご紹介します。

PipelinePilot のインテグレーション機能を活用した本システムでは、BLAST による配列ホモロジー解析、SSEARCH による Smith-Waterman アルゴリズムによる配列解析、CLUSTALW による配列マルチプルアラインメント、InterProScan による配列モチーフの検索、ZDock によるタンパク質同士のドッキング計算、アクセルリス社製 DS MODELER による構造予測、DS LigandFit によるリガンド結合予測など、バイオインフォマティクスによる創薬プロセスが Web インターフェースによる操作で容易に実行可能です。