

2003年2月27日(木) 14:10~14:35

次世代の創薬支援ソフトウェアプラットフォーム Discovery Studio? と 2003年最新リリース計画について

アクセルリス株式会社
アジアパシフィック・マーケティング&顧客サービス ディレクター
谷地 敏行

アクセルリス社では、遺伝子配列解析の GCG、蛋白質構造解析における QUANTA、Felix、CNX、生体高分子モデリングの Insight II、医薬分子設計の Cerius²、ファーマコフォーモデリングの Catalyst、ケムインフォマティクス RS³ HTS、Accord などの、この分野の代表的な製品の開発および機能強化、販売、サポートを行ってまいりました。

今日の創薬における潮流として、研究開発期間の長期化、パテント独占期間の短期化、NCE の落ち込み、爆発する塩基配列情報、化合物ライブラリの巨大化、コンビケム手法の一般化、コスト削減プレッシャーの増大、グローバル化、アライアンス・買収合併、、、今日これらの創薬プロセスにおけるボトルネックは、これまでの単品シミュレーションソフトウェアのみでは効果的な解決に取り組めるものではありません。

アクセルリス社では、統合創薬支援ソフトウェアプラットフォームである Discovery StudioTMの開発を行ってまいりました。このリリースが 2003 年より、主要製品を含めて本格化します。

Discovery StudioTMは、これまでのエキスパートが使用するハイエンドの機能サポートと、一方ではモデリングに不慣れな研究者でも比較的容易に取り組めるガイダンスつき操作メニューといったような、一見相反するニーズをうまく両立させ、さらに大容量のデータ管理をスケーラブルに行えるアーキテクチャーになっています。ラボノートブック思想への発展をも視野に入れたグラフィカルな ProjectKM アプリケーションも標準オプションとして取り込みました。

たとえば Discovery StudioTM MedChem Explorer では、数個未満のリード化合物から出発し、合成化学者がイメージしやすい化学特性評価ロジック(ファーマコフォー)と直観的な GUI(ワークフローガイドつき Windows クライアント)を通じて、より活性の高い化合物の分子設計プロセスを強力に支援します。これまで計算化学エキスパートしか活用できなかった分子設計アプローチを研究所全体でシステムチックに導入することが可能になります。

今プレゼンテーションでは、Discovery StudioTMについての概要と、代表的アプリケーション例、そして 2003 年の最新リリース計画について、ご紹介します。