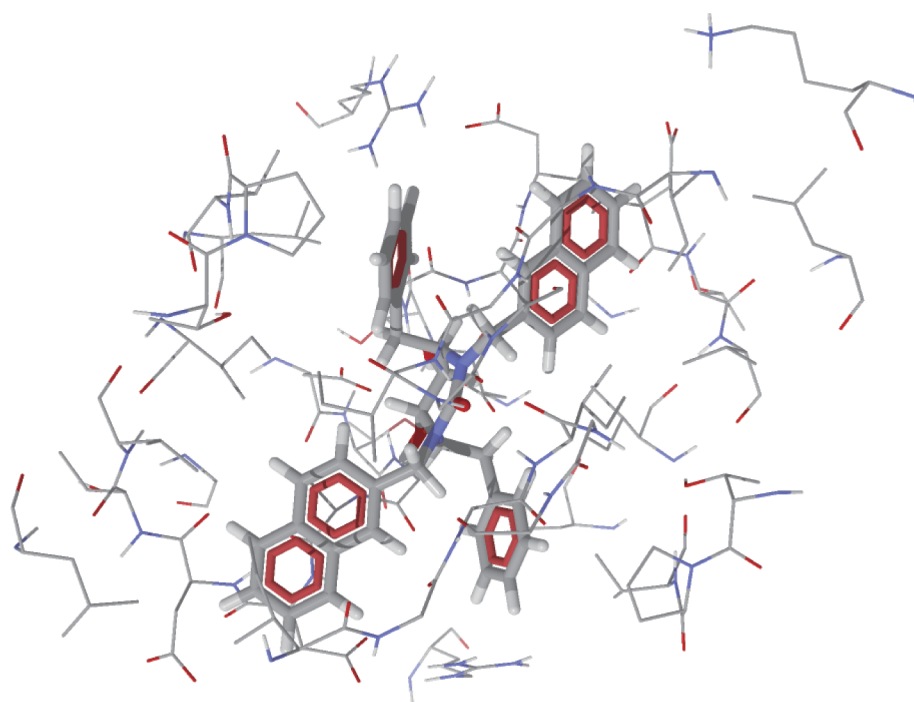


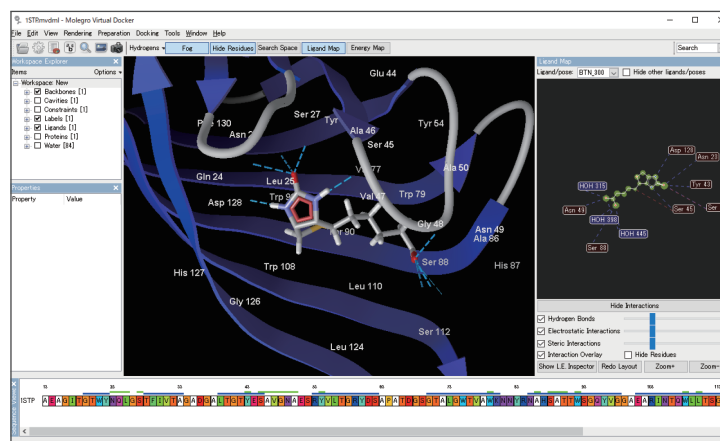
# Molegro Virtual Docker

High accuracy molecular docking



# Molegro Virtual Docker

タンパク質-リガンド相互作用を予測するための統合プラットフォームです。医薬品候補化合物とその標的レセプターの相互作用の予測と可視化により、有望な化合物を抽出し、合理的に最適化を行うことが可能となります。操作性・生産性に焦点を合わせたユーザーインターフェースを用いた、高品質なドッキングを提供します。



## Protein-Ligand Docking

リガンド分子がどのようにタンパク質と相互作用しているかを予測します。医薬品候補化合物を見つけ出すための化合物データベースのスクリーニングや既存リード化合物の改良に力を発揮します。

- 標準的なファイルフォーマットによる入出力 (PDB, Mol2, SDF など)
- 入力構造の自動前処理 (水素、チャージ、結合次数、混成など)
- 結合部位となりうるタンパク質のポケット構造の検出
- 側鎖の修復、ミューテーション、最適化
- タンパク質結合ポケットのフレキシビリティの考慮 (induced-fit)
- Displaceable water モデル (explicit な水分子の考慮)
- 関係する相互作用表示を視覚的に用いてドッキング結果を検証
- 2D および 3D 描画によるリガンドと相互作用残基の表示
- リガンドとの相互作用に有利なタンパク質内の領域を 3D ウィンドウ内で可視化
- 2D リガンドデータからの 3D コンフォメーションの生成

## 高度なドッキングシミュレーション

MVD で使用されているドッキングエンジン (MolDock) は バインディングモードを高い精度で正確に同定することが実証されています。これまでに数多くの論文で引用され、世界中の研究機関で利用されています。

MolDock は誘導微分進化アルゴリズム (guided differential evolution) と呼ばれる新しいハイブリッドサーチアルゴリズムをベースにしています。誘導微分進化アルゴリズムは、ドッキングプロセスの実行中に動的に用いられるキャビティ予測アルゴリズムに、進化アルゴリズム (evolutionary algorithms, EA) の改良型に基づいている微分進化 (differential evolution, DE) 最適化手法を組み合わせたものです。

Docking Program	Accuracy
Molegro Virtual Docker	87.0%
Glide	81.8%
GOLD	78.2%
Surflex	75.3%
FlexX	57.9%

René Thomsen and Mikael H. Christensen:  
MolDock: A New Technique for High-Accuracy Molecular Docking. J. Med. Chem., 2006, 49(11), pp. 3315 - 3321.

# Ligand Based Drug Discovery

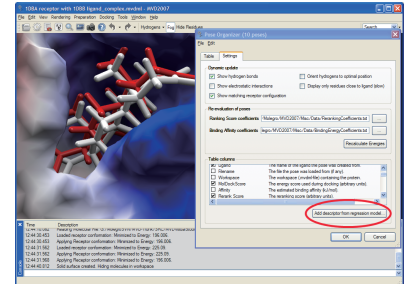
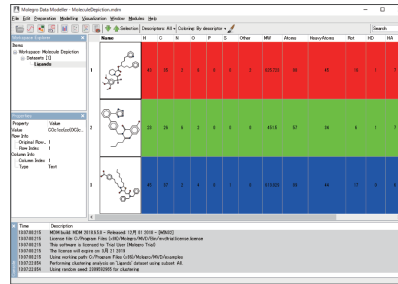
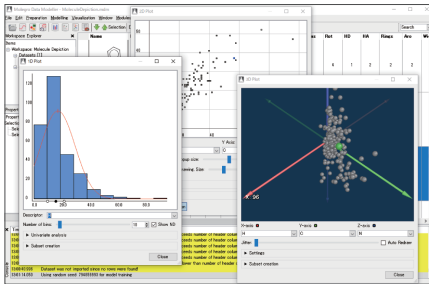
タンパク質の立体構造が未知の場合でも、既知結合体との構造的かつ化学的類似度に基づいて化合物データベースをスクリーニングすることが可能です。また、自由度を考慮した分子のアライメントや化学的性質に基づいた回帰モデル構築を行うことができます。

- 既知結合体との類似度による化合物データのスクリーニング
- 自由度を考慮したリガンドのアライメント
- QSAR モデル構築のための、分子ディスクリプター計算
- Molegro 独自の 2D CFDM トポロジカルディスクリプターの計算
- 化学特性に基づいた 3次元分子ディスクリプターの抽出
- リガンド形状や化学的特徴に基づいたスコアリングのファインチューニング

# Data Modeling, Mining, Visualization

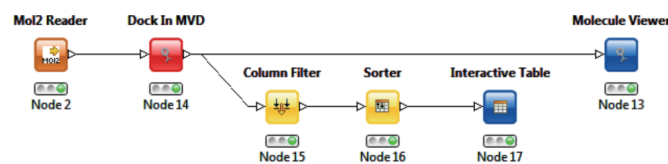
Molegro Virtual Docker にビルトインされている Molegro Data Modeler は、ニューラルネットや回帰モデルの生成、統計量の抽出、高次元データを含むデータの可視化を行います。

- ドッキングした化合物の数値特性を予測
- ユーザーが作成したモデルを Pose Organizer に直接取り込み、シームレスに詳細な分析を実行
- (サードパーティのソフトウェア等から) インポートされた数値ディスクリプターを用いて回帰モデルの作成
- ニューラルネット、サポートベクターマシンなどの回帰分析とクラス分類
- 関連するディスクリプターを見つけるための特徴選択
- 関連ディスクリプターの操作や派生ディスクリプターの生成のための、代数データ変換プラグイン
- 1D プロット (ヒストグラム)、2D プロット (X-Y プロット)、3D プロット
- 様々な統計手法



# KNIME Extensions

4つのノード (Open In MDM, Apply MDM Model, Molecular Viewer, Duck In MVD) を KNIME (ワークフロー型データ分析プラットフォーム) で実行することにより、他のソフトウェアやデータベースと容易に連携し、連続処理を行うことが可能となります。

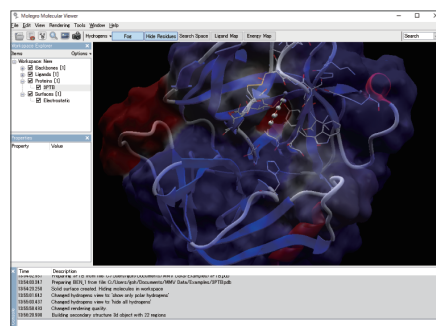


## GPU Accelerated Docking

GPU（グラフィックスプロセッシングユニット）を利用してバーチャルスクリーニング計算を行うことが可能です。適切なハードウェア（GPU）で計算を行うことで、1化合物を1秒以下でのドッキングを可能にします。計算は、標準的な NVIDIA GeForce カードで実行できますので、Quadro や Tesla といった専用のハードウェアは必要ありません。

## Molegro Molecular Viewer

タンパク質や低分子の可視化や Molegro Virtual Docker の計算結果の確認を行うことができるフリーソフトウェアです。ドッキングの機能や他の特徴的な機能は利用できませんが、追加ライセンスを購入することなく、他の MVD ユーザが生成したドッキング計算結果を共有し、議論に利用することができます。エネルギー寄与に関する情報やタンパク質のアミノ酸配列などを確認することができ、3D 空間にあるリガンドを 2D でも同時に表示できる”Ligand Map”、リガンドとの相互作用に有利なタンパク質内の領域を 3D ウィンドウ内で可視化する”Energy Map”など解析機能も搭載されています。



## ライセンスタイプ

複数のライセンスタイプをご提供しています。価格は年間使用料となり、ライセンス費用には、すべてのソフトウェアアップデートと電子メールサポートが含まれます。

### シングルユーザーライセンス:

ソフトウェアをデスクトップとノート PC など、複数のコンピュータにインストールして実行することができますが、使用は、ライセンスを受けたユーザー（1人のみ）に制限されます。

### サイトライセンス:

5ライセンスを超えるシングルユーザーライセンスを購入する場合、通常の4ライセンス分の価格でサイトライセンスが適用可能です。サイトライセンスを購入すると、そのサイトにいるすべてのメンバーがソフトウェアを使用することができます。

### 教育用ライセンス:

教師を含む与えられた研究所 / 学部のすべての学生が使用できるライセンスです。教育用ライセンスは教育目的での使用に限られますので、自身の研究活動に教育用ライセンスを使用することは許可されていません。

## フリートライアル

Molegro Virtual Docker は、30日間の無償トライアルをご試用いただけます。試用に際して、各種日本語マニュアル（Molegro Virtual Docker, Molegro Data Modeller, KNIME Extensions）も用意されておりますので、直ぐにご試用を開始することが可能です。

サポート OS: Windows 10, 8 / 8.1, 7

Ubuntu 16.04 以上

CentOS 7 以上

Apr 2021

### ■ お問い合わせ先

ノーザンサイエンスコンサルティング株式会社

<https://www.northernsc.co.jp>

〒060-0005 札幌市中央区北5条西6丁目2-2

### ■ 開発元

Molexus IVS

<http://molexus.io/>

Rørth Ellevej 3, Rørth DK-8300 Odder Denmark