

仮説、化合物設計、計算リソースを統合する薬物設計のプラットフォーム

■離れた拠点間のコラボレーションを加速

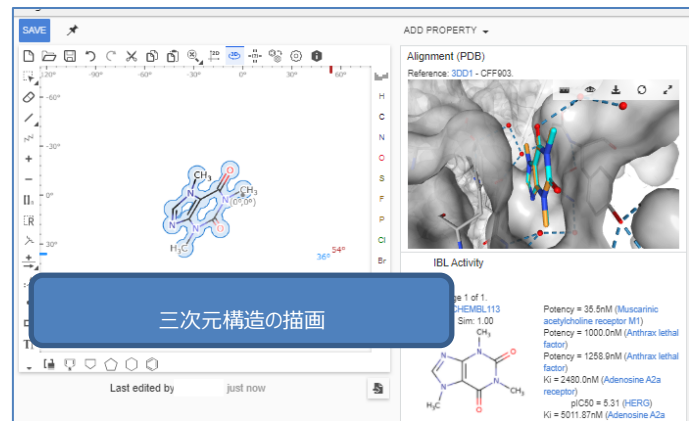
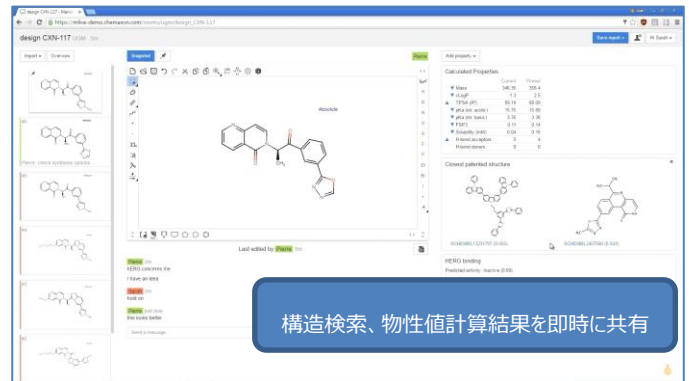
複数の拠点やチームにまたがる研究プロジェクトでは、各研究者・チーム内・プロジェクト全体でのアイデア創出や情報の蓄積、それらの共有が容易に行える、また、ストレスなくスムーズに意思疎通できるツールが求められています。化合物設計のアイデアを議論したり、設計した化合物の優先順位付けや進捗状況の管理などを行う事の出来る最適なツールとして、ChemAxon 社より Design Hub がリリースされました。

■特徴

- ブラウザからアクセスするオンラインアプリケーションであるため、化合物設計のワークフローを単一のプラットフォーム上で完結させることができる。
- Marvin JS (Web 対応構造エディタ) を用いて編集すると、描画した構造の物性の計算や既知の類似化合物の情報などをリアルタイムで表示可能。
- フレキシブルに設計できるプラグイン環境により、社内・社外の外部リソースや、分子シミュレーションツール・パイプラインツールといった ChemAxon 製品のツール・サードパーティーモジュールを取り込むことができる。
- 化合物設計 (仮説の検討、化合物のデザイン化、優先順位付け、進捗状況) に関わる情報の管理を行える。

■分子構造結果をリアルタイム表示 (プラグインシステム)

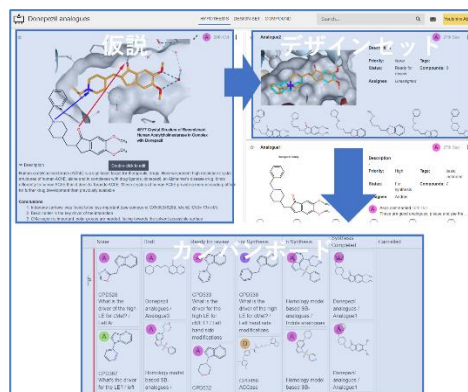
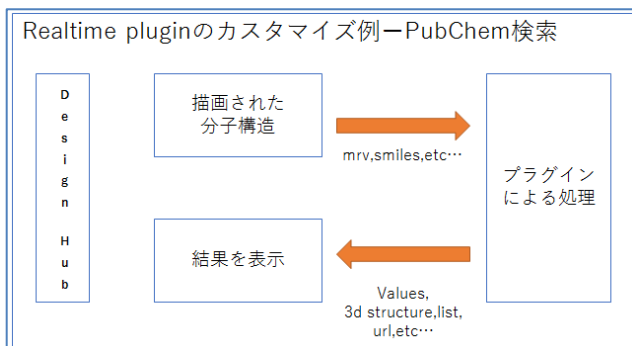
化合物設計画面では、描画した分子構造を元にプラグインシステムが処理を行い、描画した化合物の物性値を即座に計算させることや、公的 DB による構造式の検索・結果表示をリアルタイムに画面上で確認できます。また、既存化合物ライブラリーデータとの比較や絞り込み、三次元構造の描画によるファーマコフォアモデルの検討まで、高速にアイデアをレビューできます。



■プロジェクトの管理を支援

Design Hub は化合物設計に関わる情報を一元管理することにより、エビデンスに基づいた化合物設計を実現。

- ・ 仮説ごとの検討内容をまとめて管理
- ・ 分析に用いたデータをデザインセットとして保存
- ・ カンバンボードを用いて進捗状況を可視化



■動作環境

➤ サーバー要件

項目	内容
OS	Windows Server 2016 以降 Ubuntu 16.04.3 LTS RHEL/CentOS 7.0 以降 Docker-ce 18.03 以降
Memory	4Gb 使用
ディスク	500Mb 使用
DB	PostgreSQL10.1 以降
その他	JChem Microservices 20.8 以降 Marvin JS services 20.8 以降 インストール中の https://hub.chemaxon.com/ へのインターネット接続

➤ クライアント要件

項目	内容
ブラウザ	Chrome 最新版、Firefox ETS 以降 Ddge18 以降、Safari 11 以降

Patcore, Inc.

〒100-0005 東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー26F

富士通株式会社

ソーシャルデザイン事業本部 デジタルラボ事業部
〒212-0014 神奈川県川崎市幸区大宮町 1 番地 5 JR 川崎タワー24 階

URL: <https://www.fujitsu.com/jp/patcore/>

Copyright © Patcore, Inc., All rights reserved. は Patcore, Inc. の登録商標です。
その他の会社名、商品名、製品名は、一般に各社の登録商標または商標です。
本ドキュメントの記載内容、製品およびサービスの仕様は予告なく変更されることがあります。

