

平成 16 年 11 月 24 日

各 位

会 社 名 サイバネットシステム株式会社
代表者の役職氏名 代表取締役社長 井 上 恵 久
(東証第一部 コード番号 : 4 3 1 2)
問 い 合 せ 先 広 報 室 勝 又 一 徳
電 話 番 号 0 3 - 5 9 7 8 - 5 4 0 4

サイバネットシステム、 創薬向けプログラムの国内販売開始のお知らせ (形状と静電ポテンシャルによるリード化合物探索、 ドッキング検証、最適化プログラム)

サイバネットシステム株式会社(東証第一部上場 本社:東京、資本金:9億9500万円、代表取締役社長:井上 恵久、以下「サイバネットシステム」)は、米国 OpenEye Scientific Software 社(ニューメキシコ州 サンタフェ、社長兼創設者:アンソニー・ニコルス、以下「オープンアイ社」)が開発・販売・サポートする創薬向けリード化合物探索、ドッキング検証、最適化プログラムなどの製品群の国内販売を 2004 年 11 月 25 日より開始することをお知らせいたします。

ゲノム創薬に代表される薬剤開発においては、効果的な化合物探索の効率化が最大の課題とされています。その中で、薬剤となりうるリード化合物探索のため、化合物同士の類似度の評価も、より高速で高い精度が求められています。従来の 2 次元での化合物同士の類似度検証を補完する上で、より上位の 3 次元での類似度また化合物の静電ポテンシャルを基にした類似度に焦点を当てた製品や、タンパク質と化合物の相関を検証する製品群を開発しているのが、このオープンアイ社です。

オープンアイ社の製品は、アプリケーションプログラムとツールキットに大別されます。アプリケーションプログラムは、単体で利用できる製品で、化合物データベースや分子モデルファイルなどを指定し、実行します。ツールキットは、オープンアイ社の核となっている類

似度計算やドッキング検証技術を、ユーザ側で C あるいは C++言語でのソースコード内で呼び出し、そしてコンパイルし、ユーザ側の業務に適した独自アプリケーションプログラムを開発できる環境を提供するものです。

【オープンアイ社製品の製品群と機能】

■ アプリケーションプログラム

- EON
静電ポテンシャルによる類似度検証を行います。
- FILTER
大規模な化合物フィルタリングを行います。
- FRED
ドッキング検証プログラム。12 リガンド・コンフォーマ/秒の計算速度を持ち、ChemScore、PB-SA、ChemGauss、PLP、ScreenScore でのスコア出力を行います。
- OGHAM
描画情報ならびに化学名生成を行います。
- OMEGA
コンフォーマ生成を行います。高信頼性と高速性を持つマルチ・コンフォーマ生成プログラミング
- QUAC PAC
静電ポテンシャルに関わる全ての計算を効果的に行います。
- ROCS
化合物の 3 次元形状による類似度検証を行います。
- SMACK
部分構造変換フォーマット変換を行います。
- SZYBIK
MMFF モデルによる化合物分子の最適化を行います。
- VIDA
化合物やタンパク質などのビジュアライズ、他の製品からの計算結果を効率よく評価するために GUI
- WABE
等量式生成や、形状の類似度を維持したままで、静電ポテンシャルの異なる化合物群を生成し、化合物同士の比較を行います。

■ ツールキット

- CASE
SZYBIK の持つ MMFF モデルによる化合物分子の最適化機能を、C/C++から利用できる環境を提供します。
- OEChem

豊富な化学情報/計算向けライブラリと API を提供します。

- Shape
ROCS の持つ化合物の 3 次元形状による類似度検証機能を、C/C++から利用できる環境を提供します。
- Zap
静電ポテンシャル・シミュレーションを行え、トランスファ・エネルギー ~0.01s; 溶媒効果力 ~0.1s; 結合エネルギー ~1s の高速計算を行います。

【対応プラットフォーム】

- LINUX、LINUX PC クラスタ、HP-UX、Tru64UNIX、AIX、IRIX、Solaris、Mac OS X、HP-UX (64 ビット)、Tru64UNIX (64 ビット)、AIX (64 ビット)、IRIX (64 ビット)、Itanium[®]2 Linux (64 ビット)、Windows2000、WindowsXP
- EON、FRED、OMEGA、ROCS は、仮想並列計算機(Parallel Virtual Machine:PVM)を利用した分散処理が可能です。

【価格】

- サイトライセンス形態：1,220,000 円より (消費税別)

【初年度販売目標】

30 本

オープンアイ社について

同社は、1997 年に設立され社長兼創設者であるアンソニー・ニコルスを中心として、創薬向けソフトウェア製品の開発を行っています。同氏は計算化学分野で広く利用されてきた DelPhi、Grasp の開発者でもあります。さらに同社には、RasMol や Babel などの開発に携わった科学者を多く迎え、創薬における新しい視点に立った製品の開発に邁進しています。

<http://www.eyesopen.com/>

サイバネットシステム株式会社について

当社は、科学技術計算分野、特に C A E 関連の多岐にわたる先端的なソフトウェアソリューションサービスの提供を行なっております。電気機器、輸送用機器、機械、精密機器、教育・研究機関など様々な業種及び適用分野におけるソフトウェア、教育サービス、技術サポート、コンサルティング等を提供しております。構造解析、音響解析、機構解析、制御系解析、通信システム解析、信号処理、光学設計、照明解析、高周波回路解析など多様かつ世界的レベルの C A E ソフトウェアを取扱い、様々な顧客ニーズに対応しております。

<http://www.cybernet.co.jp/>

註

CAE : コンピュータによる工学的数値解析・シミュレーション

この件に関するお問い合わせ
サイバネットシステム株式会社

内容についての問い合わせ

新事業推進室

担当 / 北島 徹雄

〒112-0012 東京都文京区大塚 2 丁目 9 番 3 号 住友不動産音羽ビル 2F

TEL.03-5978-5676 FAX.03-5978-6081

E-MAIL:openeye-info@cybernet.co.jp

報道の方は

広報室 / 勝又, 松代

〒112-0012 東京都文京区大塚 2-15-6 ニッセイ音羽ビル

TEL.03-5978-5404 FAX.03-5978-5441

E-MAIL:irquery@cybernet.co.jp