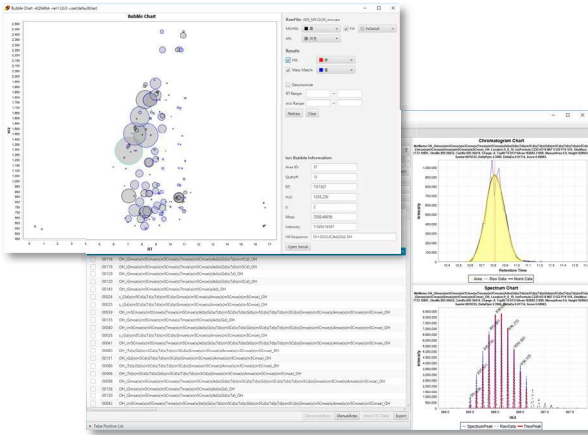


質量分析データから核酸関連物質を正確かつ効率的に分析



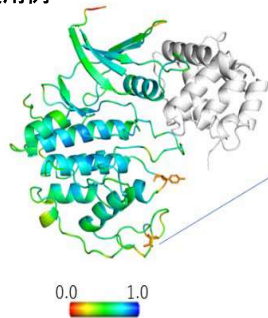
- 類を見ない柔軟かつ簡便な**核酸構造データベース**
- 核酸関連物質のピークを**自動で同定・定量**
- 核酸フラグメントイオン同定アルゴリズム「**Ariadne***」を搭載
- ヌクレアーゼ処理した**数千塩基の長鎖配列**も解析可能
- 各社分析ベンダーのフォーマットに対応

※H. Nakayama *et al.*, *Nucleic Acids Res.* 2009 Apr;37(6)

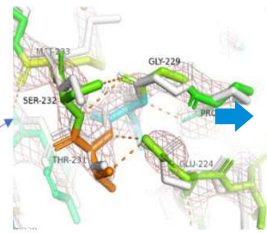
タンパク質立体構造評価システム

低分解能のタンパク質結晶構造データをアミノ酸単位で評価するAIシステム

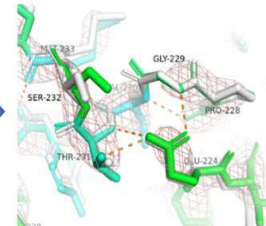
使用例



出力



ユーザーによる修正後



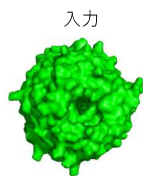
※出力データをPyMOLで可視化

- **深層学習**によりモデル構造と推定高解像度マップとの一致度を予測
- 予測値に基づいてユーザー側で**不正確な構造の検出や修正**が可能
- 低解像度マップにおける**リガンド結合有無の判定**にも利用可能

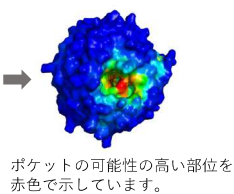
DeepSeeker

タンパク質リガンド結合領域予測システム

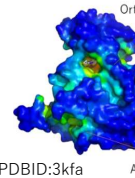
タンパク質の立体構造データを入力し、低分子化合物が結合可能な領域を予測するAIシステム



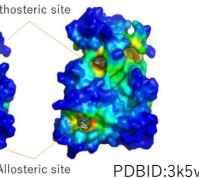
出力



Apo構造



Holo構造



※出力データをPyMOLで可視化

- リガンドが結合可能なポケットを**AIを用いて予測**
- 予測したいタンパク質に合った**独自の学習モデル**を作成可能
- ペプチド等の中分子が結合するポケットに対する低分子化合物の結合可能性を評価
- MDのスナップショット構造への評価に使用し、**バーチャルスクリーニング**に用いる構造の選出にも利用可能

