

ニュースリリース

お客様各位

2024 年 10 月 3 日

Alvascience Srl.社製 alvaDesc メジャーアップデート
並びに alvaModel/alvaRunner マイナーアップデートのお知らせ

平素より、弊社商品ならびにサービスをご愛顧頂きまして、誠にありがとうございます。
この度、Alvascience Srl.社の、分子が持つ化学的情報を数多くの特徴量に変換する定量化ツール『alvaDesc』がバージョン 3.0 にメジャーアップデートされました。

分子記述子には、34 番目の新しい記述子ブロック「SASA descriptors」を含む 133 種が追加され、全体で 5799 種が計算可能となりました。また、距離幾何学法に基づく EMBED アルゴリズムとユニバーサル・フォース・フィールドを用いた分子の 3 次元座標の計算機能が追加され、SMILES 等で入力された分子に対しても 3D 記述子を計算できるようになりました。更に、入力した分子に対して SMARTS で定義された構造パターンを同定し、特徴量として数値化する機能が追加されました。

フィンガープリントには、新しい ECFPV3 が追加されました。ECFPV3 は従来の ECFP に比べ格段に計算が速くなり、また、同位体とキラリティーの情報を使って原子を識別できるようになります。

alvaDesc に関連するソフトウェア群では、alvaDesc 3.0 のリリースに合わせ、alvaDesc を KNIME や Python で使用するモジュール alvaDesc KNIME プラグインと alvaDescCLIWrapper のアップデート、alvaDesc で計算された特徴量に基づいて QSAR/QSPR モデルを生成・適用する alvaModel/alvaRunner のマイナーバージョンアップも行われています。

更新内容等の詳細は製品ページをご確認ください。

alvaDesc: <https://www.affinity-science.com/alvadesc/>

alvaModel/alvaRunner: <https://www.affinity-science.com/alvamodel-alvarunner/>

本件に関するお問合せ先：

株式会社アフィニティサイエンス 営業部

電話：03-6417-3695 / Email：sales@affinity-science.com

(受付：平日午前 9 時～午後 6 時まで)