

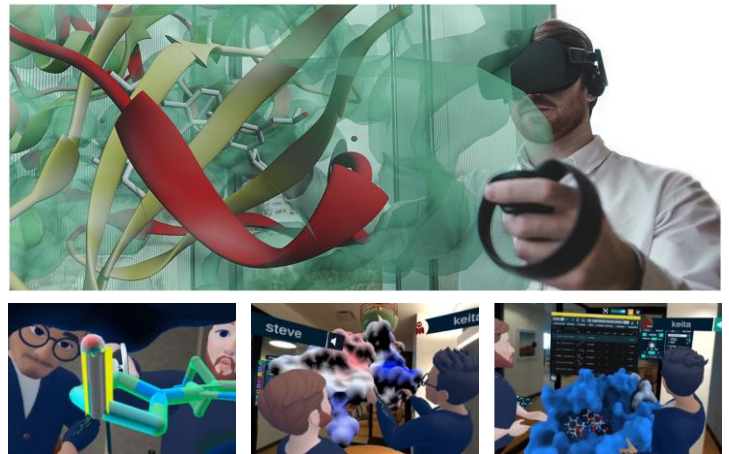
# Smart Lab

## 次世代の分子設計を支援する 創薬研究用VRアプリケーション

### Nanome / MARA

Nanomeは、創薬研究を加速する没入型XR（VR/AR）コラボレーションプラットフォームです。2次元では困難だったタンパク質の複雑な立体構造や、薬剤候補との相互作用をバーチャル空間で3Dとして直感的に視覚化・理解できます。分子メカニズムの理解の促進、リード化合物の最適化や新規薬剤設計の効率を飛躍的に向上させます。MARAは、ChatGPTなどの最新のLLM技術を活用した対話型AIエージェントシステムです。社内データベースや市販/OSSの計算ツールと連携し、研究者は自然言語で対話しながら複雑なデータ処理や分子設計を実行します。これにより、IT技術・専門ツールの操作習熟度に関わらず誰もが高度な機能を容易に活用でき、研究プロセスを効率化し、創薬開発を加速します。

- **グローバルなコラボレーション**  
遠地のチームメンバーと仮想空間の中でコラボレーションしてアイデアを共有することが可能
- **統合型・柔軟な拡張性**  
プラグインシステムを通じて他のソフトウェアやデータベースとシームレスに接続可能
- **直感的な構造操作**  
自分の手で分子を自然に動かして操作できる没入型の3次元環境

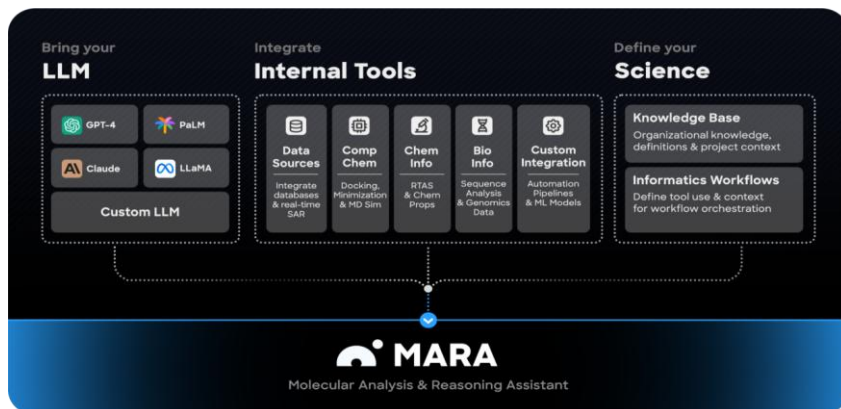


#### 【プラグインシステムの事例】バーチャル空間でシミュレーションが可能

			
相互作用解析	物性計算	配座探索	ドッキングシミュレーション
			
静電ポテンシャル	リアルタイムスコアリング	タンパク質の重ね合わせ	立体構造の前処理
			
高画質なサーフェイス表示	構造最適化	水素付加	ファイル共有

# MARA (Molecular Analysis and Reasoning Assistant)

最新のLLMに対応したMARAは、科学情報科学のためのAIエージェントシステムです。社内のデータベースや計算ツールをシームレスに統合してワークフローを構築できるようにします。研究者のAIアシスタントとして、自然言語による指示をMARAが解釈、適切なツールを選択・実行して、シンプルで明確な結果を出力します。



## ドッキングシミュレーション

**Drug Discovery - CADD**  
Example chat by Nanome

2024/07/15 0:42

Download PDB 7L10, remove ligands and prepare for docking

1. Download PDB File from RCSB Protein Data Bank using PDB Code  
 2. Extract protein from PDB or mmCIF File  
 3. Convert PDB to PDBQT for AutoDock Vina-based docking

The PDB file for 7L10 has been prepared for docking. The protein has been extracted and converted to PDBQT format for AutoDock Vina-based docking. The prepared file is located at `D:\7L10_proteinonly_set_ar10c.pdbqt`.

7L10\_proteinonly\_set\_ar10c.pdbqt

Where are the binding pockets?

Find pockets of the input protein

The binding pockets in the PDBQT file are as follows:

Pocket ID	Score	Center X	Center Y	Center Z
1	8.23	-16.6850	-9.1466	10.2444
2	7.62	8.5994	1.7062	22.0173

## 実験データの主成分分析

**Cheminformatics - PCA**  
Example chat by Nanome

2024/07/15 9:57

What are the numerical columns in this csv file?  
\*EGFR\_unique.csv

Understand csv file content

The numerical columns in the CSV file `D:\EGFR_unique.csv` are: MolRegNo, Value, pValue, Ligand Efficiency, Binding Efficiency, Surface Efficiency, cLogP, cLogS, H-Acceptors, H-Donors, Total Surface Area, Relative PSA, Polar Surface Area, Druglikeness, Shape Index, Molecular Flexibility, Molecular Complexity, Globularity, SVD, Globularity, Vol.

Create PCA on this dataset using these columns, excluding MolRegNo, value and pValue

Perform PCA on your numerical dataset

The PCA analysis on `D:\EGFR_unique.csv` using the specified columns is complete. The PCA generated 8 components to reach a cumulative variance ratio of 0.9545. The PC values have been added to the data table in `D:\EGFR_unique_PCA.csv`.

Plot the first 3 principal components

Generate a 2D or 3D scatter plot using provided CSV file

The 3D scatter plot of the first 3 principal components from `D:\EGFR_unique_PCA.csv` has been generated and saved as `D:\scatter.svg`.

## MDの計算結果の解析

**Computational Chemistry - MD**  
Example chat by Nanome

2024/07/15 9:57

Give me some details about this trajectory  
\*prod\_align.pdb \*prod\_align.xtc

Get basic information about an MD trajectory

The trajectory files `D:\prod_align.xtc` and `D:\prod_align.pdb` contain 110 frames with a time step of 10 ps and a total simulation time of 10 ns.

prod\_align.pdb

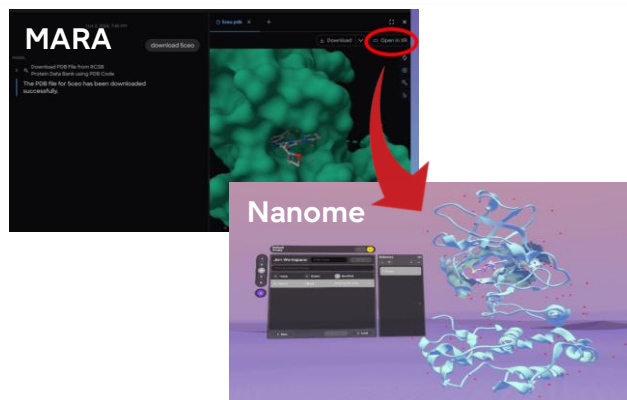
Calculate the distance between HZ1 in LYS146 and O2 in MOL600 from the trajectory

Calculate and plot pairwise distance from an MD trajectory

The distance between HZ1 in LYS146 and O2 in MOL600 from the trajectory has been calculated. You can view the plot [here \(dist.svg\)](#) and the distance values [here](#).

## <MARAの特長>

- **対話型GUI**  
自然言語を使用したチャット形式のGUI
- **信頼できる結果**  
一般的なLLMはハルシネーションを発生するが、MARAは再現性のある結果を出力、計算履歴を確認可能
- **アプリ連結/ワークフロー化**  
社内DB、計算ツールと連結してWF構築可能
- **標準ツールの提供**  
100以上のケモインフォマティクスツールを標準搭載



MARAで処理した構造をVR空間にロード

Nanome開発元



Nanome Inc  
<https://nanome.ai/>

お問い合わせ先

富士通株式会社

クロスインダストリーソリューション事業本部 Healthy Living事業部 Life Scienceグループ  
contact-nanome@cs.jp.fujitsu.com