

Fiche logiciel n°4*

TSAR

Auteurs et/ou diffuseurs : Oxford Molecular SA

RESSOURCES

TSAR est opérationnel sur les stations Unix suivantes :

- Silicon Graphics tous modèles
- Hewlett-Packard 9000 série 700
- IBM Risc/6000 (avec bibliothèque Phigs et run-time Fortran)

Pour toutes ces stations de travail, une carte graphique 24 bits/Z-buffer est recommandée

RÉALISATION

Auteurs :

Dr R. Lahana (Centre de Recherche Pierre Fabre et Oxford Molecular), Prof. G. Grassy (Centre de Biologie Structurale de Montpellier), Dr T. Koscielniak (OMSA, Palaiseau), Dr J. Woods (Oxford Molecular, Oxford)

Langage utilisé : Fortran, C

Volume des instructions : supérieur à 100 000 lignes

Org. ayant participé au financement : CRPF, OML

Date de la dernière version : juillet 1993

État du logiciel : progiciel

Version de démonstration : version bridée

DIFFUSION

Oxford Molecular SA - Tél. : (1) 69.33.35.90

Nature de la diffusion : commerciale

Support de diffusion : cartouche 150 MB ou DAT 4 mm

Format : binaire

Suivi du produit : assistance, maintenance et formation assurées. Télémaintenance possible par réseau. Une version majeure par an + une version intermédiaire par trimestre. Collaborations envisageables

Conditions financières : les prix sont fonction de la machine. Conditions spéciales pour les sites académiques (universités, CNRS, Inserm, écoles, etc.)

Obligations de l'acquéreur : licence d'utilisation

Particularités techniques de l'installation : installation assurée par la société ou par l'utilisateur. La bande contient un utilitaire d'installation automatique

Références d'installation : - France : Synthelabo, Fabre, Ibesis, Fournier, etc., plusieurs dizaines d'universités- Étranger : Glaxo, Smith Kline Beecham, Pfizer, Hoffmann Laroche, etc., plusieurs dizaines d'universités...

Nombre d'installations : supérieur à 100.

DOCUMENTATION

Manuel d'utilisation, plaquette de présentation, jeux de tests.

ADRESSES

Oxford Molecular SA - X-Pole, École polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex. Tél. : (1) 69.33.35.90. Fax : (1) 69.33.30.41.

Oxford Molecular Ltd - The Magdalen Centre, Oxford Science Park, Sandford on Thames, Oxford OX4 4GA, UK. Tél. : +44 865.784.600. Fax : +44 865.784.601.

Oxford Molecular GmbH - Am Sportplatz 8, D-6108 Weiterstadt, Allemagne. Tél. : +49 6150.52.654. Fax : +49 6150.52.654.

Oxford Molecular Inc - 744 San Antonio Road, Suite 27 Palo Alto, CA 94 303, USA. Tél. : +1 415.494.6274. Fax : +1 415.494.7140.

Fiche logiciel n° 4 - suite

TSAR

MOTS CLÉS

Relations structure-activité
 QSAR
 Statistiques multivariées
 Pharmacophores
 Descripteurs topologiques

DÉFINITION

TSAR (Tools for Structure Activity Relationships) est un produit intégrant toutes les fonctionnalités nécessaires pour traiter des problèmes de relations structure-activité, au travers d'un tableur moléculaire puissant et convivial.

DESCRIPTION

TSAR est constitué des cinq blocs fonctionnels suivants :

- **Tableur moléculaire** : il permet de manipuler aisément à la fois des données numériques ou alphanumériques et des structures moléculaires. Celles-ci sont soit des molécules, soit des groupes fonctionnels (substituants) associés à une molécule générique. On peut visualiser jusqu'à 5 substituants par molécule. Il est également possible d'importer toute série de valeurs sauvegardée dans un fichier ASCII et d'appliquer des fonctions mathématiques sur les colonnes

- **Générateur de descripteurs** : pour une molécule ou un substituant, on peut calculer une large variété de descripteurs topologiques, tels que les indices de Kier et les autocorrélogrammes de Moreau. D'autres descripteurs permettent la mise en évidence de pharmacophores ou de tout un ensemble de caractéristiques tridimensionnelles, électroniques ou moléculaires (indices de Verloop, Sigma et Pi de Taft, surface, inertie, moment dipolaire, Log P, etc.)

- **Analyse statistiques** : régression multiple pas à pas, analyse discriminante pas à pas, analyse en composantes principales, PLS (partial least squares), classification hiérarchique, plus proches voisins, etc. Cross validation, détail des calculs sauvegardables

- **Bases de données de substituants** : de très nombreux groupements fonctionnels associés à des descripteurs venant de la littérature sont rassemblés en bases de données accessibles depuis le tableur. L'utilisateur peut créer ses propres bases ou enrichir celles existantes

Visualiseur : nombreux types d'affichage (courbes, tracés 2D ou 3D, nuages de points, dendogrammes, etc.) avec codages de couleurs ajustables en fonction de n'importe quelle colonne du tableur et outils d'analyse graphique des résultats

TSAR peut importer des molécules suivant plusieurs formats (MAD, PDB, CSSR, Tripos molfiles, MDL molfiles et SD files) et complète donc parfaitement n'importe quel programme de modélisation

TSAR inclut une interface complète avec ASP, le programme de similitude moléculaire développé par le Prof. Graham Richards et diffusé par Oxford Molecular

Autres produits complémentaires diffusés par Oxford Molecular :

- **Cobra** : analyse conformationnelle automatique par intelligence artificielle. Conversion 2D/3D d'une chaîne Smiles

- **ASP** : similitude moléculaire quantitative

- **Anaconda** : comparaisons de propriétés de surfaces par projection gnomonique

- **Proquantum** : package de mécanique quantique complet, permettant entre autres l'évaluation de la réactivité et des caractéristiques spectroscopiques d'une molécule. Interfaces avec Mopac V6, Ehprop et Cadpac

- **Proexploire** : prédiction de structure secondaire, alignements multiples de séquences et homologie

- **Prosimulate** : simulation par dynamique moléculaire de macromolécules ou de petites molécules. Très nombreuses fonctionnalités. Les moteurs interfacés sont Gromos et Amber

- **Mad** : progiciel de modélisation moléculaire généralistes, permettant la construction, la manipulation, l'analyse conformationnelle et le calcul de propriétés physico-chimiques de molécules

- **Iditis** : base de données relationnelle de structures de protéines.

- **ABM** : modélisation d'anticorps (de la séquence à la structure tridimensionnelle)

- **Nemesis** : logiciel de modélisation pour Macintosh et PC/Windows