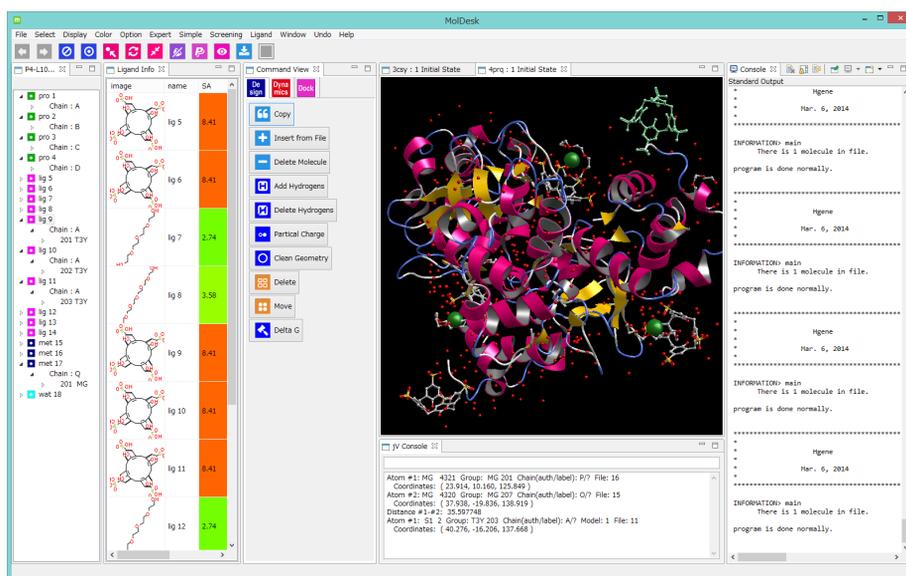


myPresto/MolDeskを用いたインシリコ・スクリーニング計算実習会のご案内

myPrestoは、経済産業省、NEDO及びAMEDからの委託プロジェクトの中で開発された医薬品開発支援の分子シミュレーションシステムで、無料で利用でき、国内30社で使われています。myPrestoには、分子動力学(molecular dynamics (MD))計算、ドッキング計算、多数の異なる手法を利用できるインシリコ・スクリーニング計算、低分子化合物の2D→3D変換・水素原子付加・部分電荷付加、化合物の合成容易性予測計算等、多数のプログラムが用意されています。myPrestoを使いやすくするためのグラフィック・ユーザー・インターフェース(GUI)ソフトウェアは、民間企業により開発されて販売されています。

今回の実習では、株式会社情報数理バイオが開発した有料のGUIソフトウェアMolDeskを使って入力ファイルを作成し、FOCUSスパコン上でmyPrestoのプログラムを実行することによって、インシリコ・スクリーニング計算の実習を行います。



MolDeskの操作画面

〔関連URL〕

MolDesk (株式会社情報数理バイオの製品)のwebサイト: <http://www.moldesk.com>

myPrestoのwebサイト(JBIC): <http://www.jbic.or.jp/enterprise/result/001.html>

myPrestoのダウンロードサイト(大阪大学): <http://presto.protein.osaka-u.ac.jp/myPresto4/>

開催日時: 2017年12月6日(水) 13:00~17:00

場 所: 公益財団法人 計算科学振興財団

高度計算科学研究支援センター 2階 実習室

兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-28 計算科学センタービル

(最寄り駅「京コンピュータ前駅」(ポートライナー)より徒歩約3分)

定 員: 20名(申し込み順に受付け、20名に達したら締め切ります。)

参 加 費: 無料

申し込み締切: 2017年12月4日(月) 17:00

申し込み先: 株式会社バイオモデリングリサーチ・中村寛則

E-mail: nakamura@biomodeling.co.jp