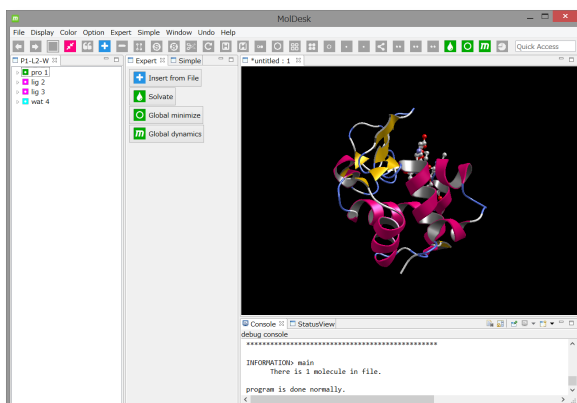


創薬計算用ソフトウェアmyPrestoを用いた インシリコ・スクリーニング計算実習会

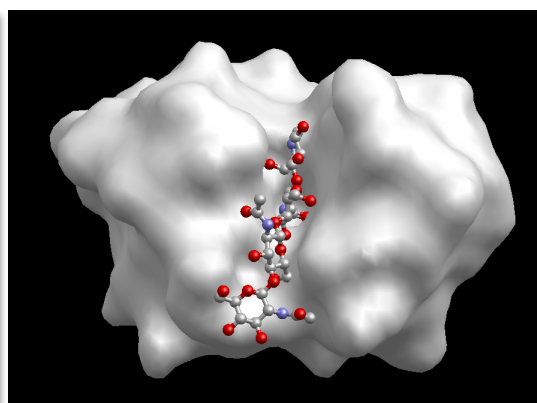
myPrestoは、経済産業省及びNEDOからの委託で実施されたプロジェクトの中で開発された医薬品開発支援用の分子シミュレーションシステムで、従来に比べて短時間で高精度・高能率に、タンパク質等のモデリング、膜蛋白の計算、薬物ドッキング・薬物スクリーニング等を行うことができます。myPrestoのプログラム群および計算用データは、大阪大学のwebサイトからダウンロードでき、無料で利用することができます。

本実習会では、myPrestoを使ったインシリコ・スクリーニング計算について実習します。ドッキング用のタンパク質立体構造情報の準備(水素原子付加、部分電荷付加等)やターゲットサイトの指定等は、端末室のPCでグラフィック・ユーザー・インターフェイスを使った操作で視覚的に確認しながら行い、時間がかかるメインのドッキング計算はFOCUSスパコンで行います。計算準備には、株式会社情報数理バイオが新しく開発したmyPresto用GUIプログラムMolDeskを使用します。FOCUSスパコンを使用すると、スクリーニング計算を非常に短時間で完了することができます。例えば、200コアを同時に使用すると、200万化合物に対する計算は約4時間で完了します。同様の計算は、他の計算機システムでも実施できます。

開催日時: 2015年7月16日(木) 13:00~17:00
場所: 公益財団法人 計算科学振興財団 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2階
(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)
参加費: 無料
申し込み締切: 2015年7月13日(月) 16:00
定員: 20名(申し込み締切前でも20名に達したら締め切ります。)
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



MolDeskの画面の例1



MolDeskの画面の例2

- 実習会は、FOCUSスパコンユーザー様でなくても参加できます。
- アカデミアの方も参加できます。ただし、FOCUSスパコンは産業用スパコンなので、実習会以外では、アカデミアの方は単独ではFOCUSスパコンを利用することができません。法人との共同利用は可能です。

[関連URL]

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

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

LigandBOX (大阪大学): <http://ligandbox.protein.osaka-u.ac.jp/ligandbox/>

MolDesk (株式会社情報数理バイオ): <http://www.moldesk.com>

主催: 株式会社バイオモデリングリサーチ
<http://www.biomodeling.co.jp>

BioMoDeLing
Research