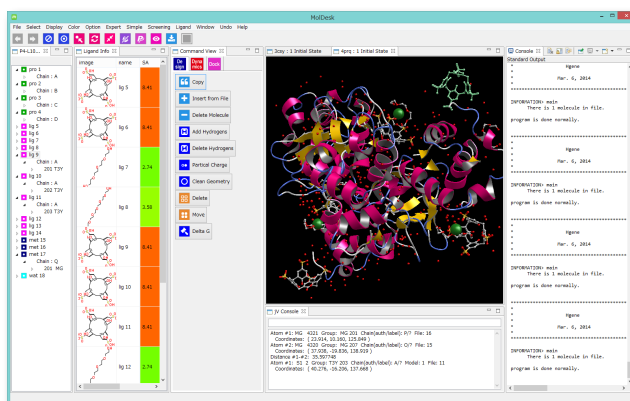


創薬支援ソフトmyPresto/MolDeskの 実践的実習会のご案内

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myPrestoのプログラムを実行します。Microsoft Azureのサーバー上にインストールしたMolDeskを、ノートPCから操作して、実践的な創薬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10月31日(火) 13:00~16:30

場 所: 株式会社 情報数理バイオ 会議室

東京都豊島区東池袋4-21-1 アウルタワー6F (601号室)

<http://www.imsbio.co.jp/company/access/>

定 員: 7名(申し込み順に受付け、7名に達したら締め切ります。)

参 加 費: 無料


参加に必要な条件: Microsoft Remote DesktopをインストールしたノートPCを持参すること(MacBook/MacBookProでもOK)。事前登録が必要。事前にリモートデスクトップ接続の練習をする予定です。

申し込み締切: 2017年10月27日(金) 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

BioMoDeLing
Research

 情報数理バイオ

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

株式会社情報数理バイオ
<http://www.imsbio.co.jp/>