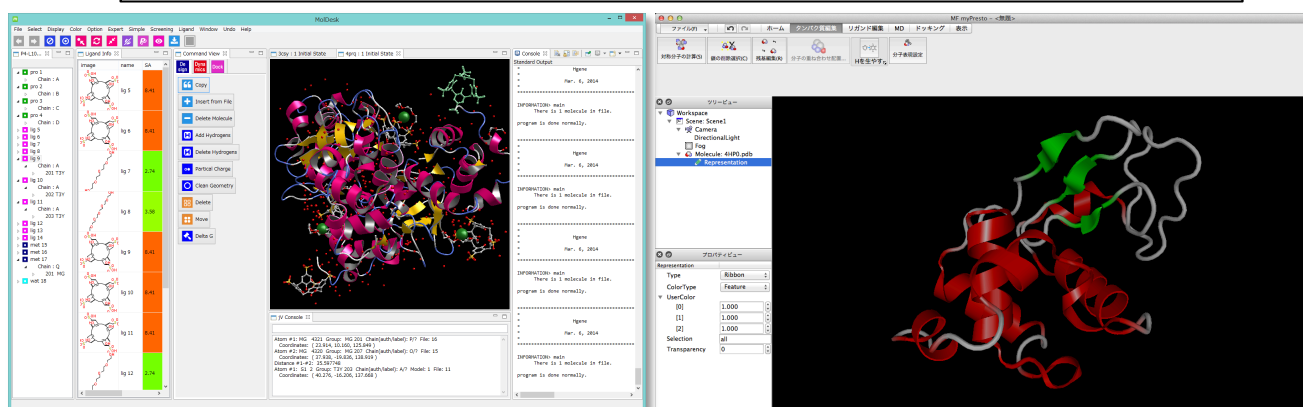


創薬計算用ソフトウェアmyPrestoを用いた インシリコ・スクリーニング計算実習会

myPrestoは、AMED、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の分子シミュレーションシステムです。

本実習会では、myPrestoを用いたインシリコ・スクリーニング計算について実習します。ドッキングプログラムsievgeneを用いて、ターゲットタンパク質と低分子化合物とのドッキングを、化合物ライブラリLigandBOXに含まれる200万種類の化合物を対象として行います。スクリーニング計算の前半は、実習室の端末PCでmyPresto用GUIプログラムを使用し、グラフィック画面を見ながら計算の準備を行います。後半は、準備したファイルをFOCUSスパコンに転送してコマンドライン実行で計算を行います。コマンドラインで実行するmyPrestoのプログラムは無料で利用可能ですが、myPresto活用支援ツールとして開発されたGUIプログラムは有料のものです。

開催日時: 1日目: 2015年11月25日(水) 13:00~17:00 (MolDesk Basic使用)
2日目: 2015年11月26日(木) 13:00~17:00 (MF myPresto ver.2使用)
(1日目と2日目ではほぼ同じ計算内容ですが、計算前半で使用するソフトウェアが異なります。どちらか一方にご参加ください。両方に参加することも可能です。)
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)
定員: 各日20名(申し込み順に受け、20名に達したら締め切ります。)
参加費: 無料
申し込み締切: 2015年11月23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



MolDesk Basicの操作画面(1日目に使用)

MF myPresto ver.2の操作画面(2日目に使用)

【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/>

myPrestoを活用した有料ソフトウェア:

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

MF myPresto(株式会社フィアラックス): <http://www.fiatlux.co.jp>

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