

# myPrestoを用いたMDとドッキングの連携計算 実習会開催のご案内

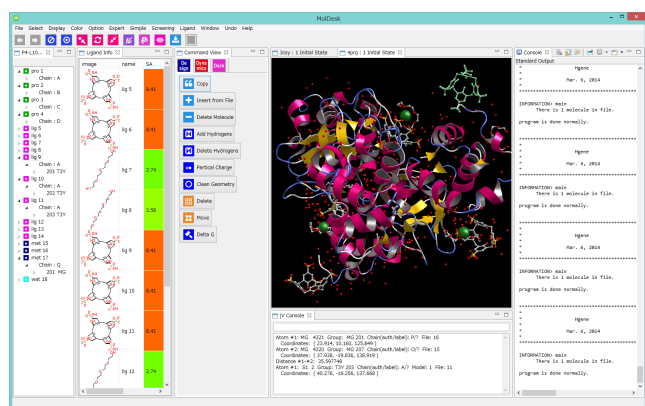
myPrestoは、経済産業省、NEDO及びAMEDからの委託プロジェクトの中で開発された医薬品開発支援の分子シミュレーションシステムで、無料で利用でき、国内30社で使われています。

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、結合自由エネルギー計算、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のプログラムが用意されています。

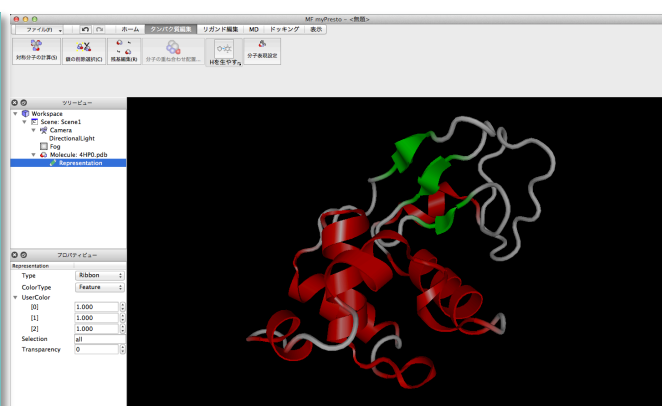
実習会では、FOCUSスパコンを使って、MD計算とドッキング計算とを連携させた計算を実行します。具体的には、以下の内容について実習します。

- (1) リガンド・タンパク質複合体のX線結晶構造を初期構造とした水中でのMD計算
  - (2) MD計算で得られたトラジェクトリーからのタンパク質立体構造の抽出
  - (3) 新しく取得したタンパク質立体構造を用いたインシリコ・スクリーニング(ドッキング)
  - (4) インシリコ・スクリーニングでランキング上位の化合物とタンパク質との複合体のMD計算
- これらの計算は、ヒット率の高いインシリコ・スクリーニング計算や、スクリーニング計算で選出した化合物の結合自由エネルギーによる再評価等に発展させることができます。

実習会では、有料のmyPresto用GUIプログラム(MolDesk BasicとMF myPresto)も利用して、分子の観察、計算用入力ファイルの効率的な作成のデモンストレーション等を行う予定です。



MolDesk Basicの操作画面



MF myPresto の操作画面

## 【関連URL】

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/>

市販されているmyPresto用GUIプログラム(マウス操作でmyPrestoのプログラムを実行可能):

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

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

開催日時: 2016年7月28日(木) 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: 2016年7月26日(火) 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](mailto:nakamura@biomodeling.co.jp)

株式会社バイオモデリングリサーチ

<http://www.biomodeling.co.jp>