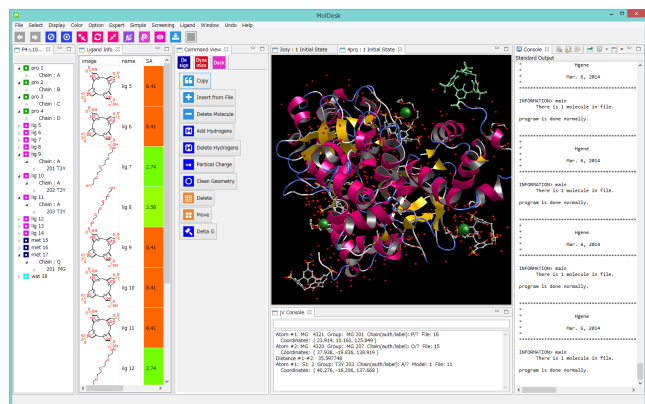


# myPrestoを用いた機械学習MTS法による スクリーニング計算実習会開催のご案内

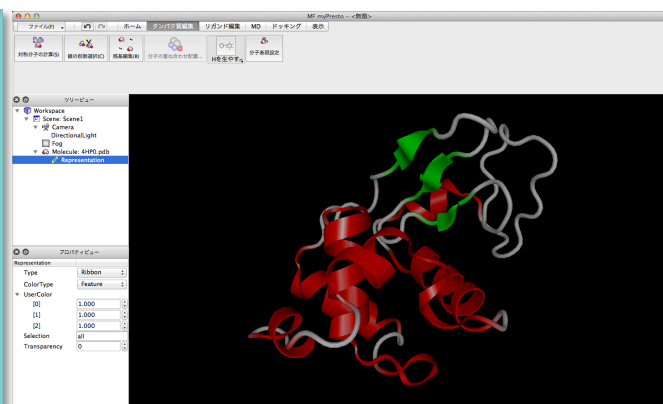
myPrestoは、経済産業省、NEDO及びAMEDからの委託プロジェクトの中で開発された医薬品開発支援の分子シミュレーションシステムで、無料で利用でき、国内30社で使われています。

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、多数のプログラムが用意されています。

今回の実習会では、機械学習MTS(multiple target screening)法を用いたスクリーニング計算の実行方法について実習します。機械学習MTS法は、タンパク質の立体構造情報に基づくドッキング計算に加えて、既知活性化合物の情報を利用した機械学習をすることにより、ヒット率を向上させたスクリーニング計算方法です。既知活性化合物の準備は、SDフォーマット形式の2次元構造情報から、水素原子付加、部分電荷付加、3次元化の処理を行い、mol2フォーマット形式のファイルに変換して行います。実習会では、有料のmyPresto用GUIプログラム(MolDeskとMF myPresto)を利用した入力ファイルの作成についても実習します。



MolDesk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: 2017年3月2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: 2017年2月28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>