

# myPrestoとMF myPrestoを用いた インシリコ・スクリーニング実習会

内容：創薬計算用ソフトウェアmyPrestoを使ったインシリコ・スクリーニングの計算手順を実習します。実習室のPCで、myPresto用GUIプログラム(MF myPresto)を用いて計算準備をし、主な計算はFOCUSスパコンにジョブ投入して行います。想定する計算の目的は、薬剤候補化合物を実際に購入することです。大阪大学のwebサイトで公開されている化合物ライブラリ(LigandBOX)に含まれる購入可能化合物ライブラリ(200万化合物)に対するドッキングを、100コア以上を同時に用いて迅速に行うことを想定した計算手順についての実習です。(実習中に200万化合物に対する計算を実際に行う訳ではありません。計算の一部のジョブ投入と、計算済みデータを使った処理は行います。) 実習は、チュートリアルを見ながら説明に従って操作をしていただくだけです。実験研究者でも参加できます。

開催日時：2014年11月5日 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)  
定員：20名(申し込み順に受け付け、20名に達したら締め切ります。)  
参加費：無料  
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

このような方にオススメです：

- ・これからインシリコ・スクリーニングをしたいと思っている方(実験研究者でも可)
- ・既に他のドッキングプログラムを使っているがプログラムの種類を増やしたい方
- ・ローカルPCでのみ計算しているがサーバーを使って短時間で計算したい方
- ・200万化合物に対するインシリコ・スクリーニングを実施したい方

実習会は、FOCUSスパコンユーザーでなくても、アカデミアの方でも参加できます。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。

本実習会ではFOCUSスパコンを使用しますが、お手持ちのサーバー、もしくは、大学の計算機センターのサーバー等で、同様の計算を実施することができます。ただし、計算機環境に応じて、myPrestoのスクリプトプログラムの変更が必要です。変更が必要な箇所や、代表的なシステムでの変更例については実習会で説明します。ご自身で変更が困難な方は、(株)バイオモデリングリサーチの支援サービスをご利用いただけます(有料)。

[myPrestoとMF myPrestoについて]

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分子シミュレーションを構成するプログラム群等です。医薬品開発支援のために作成され、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高速に行うことができます。myPrestoは大阪大学のwebサイトからダウンロードできます(無料)。

MF myPresto は、株式会社フィアラックスが開発したmyPresto用GUIプログラム(有料)です。

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のwebサイト(大阪大学)：<http://ligandbox.protein.osaka-u.ac.jp/ligandbox/>

株式会社フィアラックスのwebサイト：<http://www.fiatlux.co.jp>

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

**BioMoDeLing**  
**Research**