

CBI 学会 2023 年大会 スポンサー企業企画枠

主催：一般社団法人バイオ産業情報化コンソーシアム

『創薬支援ソフト myPresto5』 活用セミナー

日時：10月24日(火) 13:30 ~ 15:00

会場：タワーホール船堀 4F (402)

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 社以上で使われています。本セミナーでは、最新の myPresto についての紹介、操作デモ等を行います。

演者：株式会社バイオモデリングリサーチ 代表取締役 中村寛則

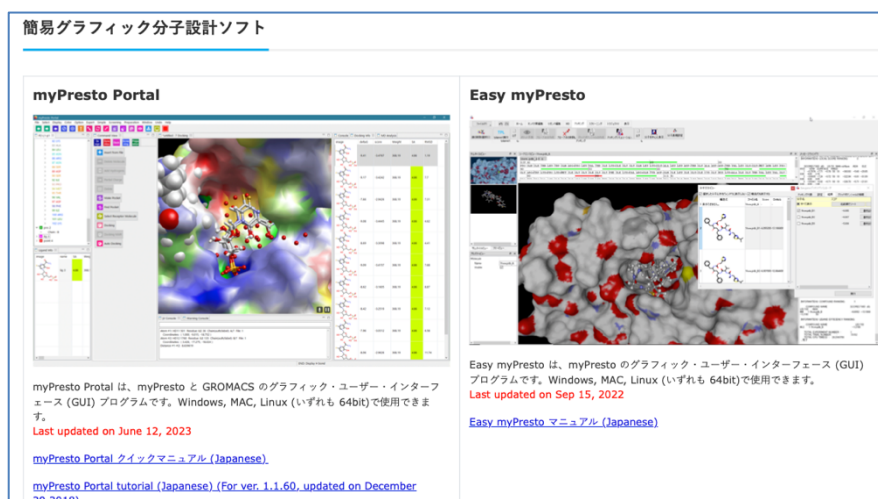
プログラム：

13:30 ~ 13:45 myPresto5 の概要紹介

13:45 ~ 14:15 myPresto5 の新しい機能の紹介

14:15 ~ 14:45 myPresto5 の実行デモ

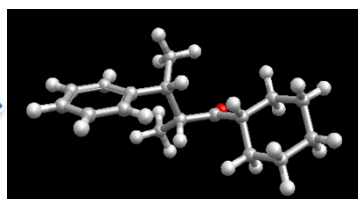
14:45 ~ 15:00 myPresto5 の活用を支援する商用サービスについて



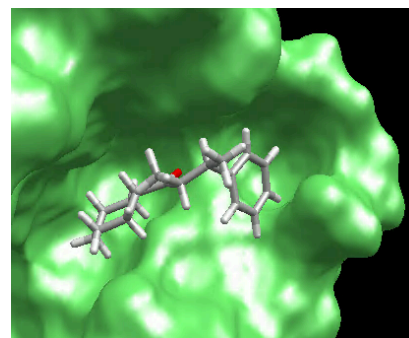
myPresto の 2 つの簡易 GUI ソフト (myPresto Portal, Easy myPresto)
(図はダウンロードサイトのキャプチャー画像)

myPresto は、50 個以上のプログラムからなるプログラムセットで、分子動力学シミュレーション、ドッキング・シミュレーション、低分子化合物の 2D→3D 変換、インシリコ・スクリーニング、結合自由エネルギー計算、化合物の合成容易性予測計算等、多数の機能が用意されています。myPresto のプログラムは、多様な計算環境で実行可能で、ノートパソコンでもスパコンでも実行することもできます。一部の機能はグラフィック・ユーザー・インターフェイス (GUI) プログラム (myPresto Portal, Easy myPresto) によって、マウス操作で簡単に使えるようになっています。最近の機能追加としては、GROMACS との連携、膜タンパク質系構築機能、RNA 分子の MD 計算機能等が挙げられます。myPresto の活用を支援する商用ソフトウェア、商用サービスについても紹介します。

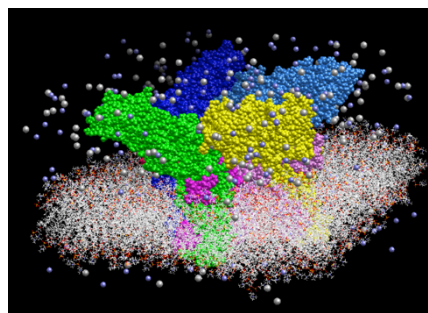
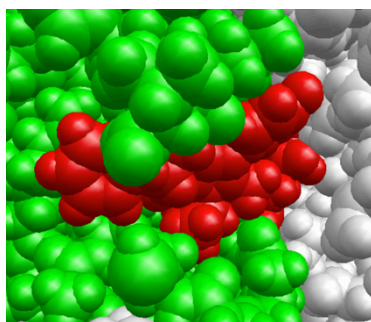
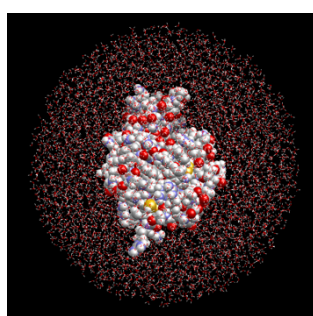
myPresto で利用可能な機能の例



化合物情報の 2D→3D 変換 2D



ドッキング・シミュレーション



分子動力学シミュレーション

参考 URL:

myPresto のダウンロードサイト: <https://www.mypresto5.jp>

一般社団法人バイオ産業情報化コンソーシアム (JBIC): <https://www.jbic.or.jp>

お問い合わせ先:

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

Tel: 052-720-7704 E-mail: info@biomodelling.co.jp