

株式会社バイオモデリングリサーチ スポンサー企業企画枠

CBI 学会 2017 年大会

『創薬支援ソフト myPresto』活用セミナー

日時: 10 月 3 日(火) 14:00 ~ 15:30

会場: タワーホール船堀 4F (402)

株式会社バイオモデリングリサーチは、主にライフサイエンス分野の研究者を対象に、ソフトウェア、計算リソース等の効率的な活用を支援するサービスを提供しています。本スポンサー企業企画枠では、セミナー形式で創薬支援ソフト myPresto を活用するための情報提供を行います。

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:

14:00 ~ 14:20 myPresto の概要紹介

14:20 ~ 14:50 myPresto の実行デモ

14:50 ~ 15:00 myPresto を実行可能な計算環境について

15:00 ~ 15:30 myPresto の活用を支援する商用サービスについて

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 だけで多種類の創薬計算を実行することができます。myPresto には、分子動力学計算、ドッキング計算、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。インシリコ・スクリーニング用には、マルチプル・ターゲット・スクリーニング法(MTS 法)やドッキング・スコア・インデックス法(DSI 法)等、複数の手法に対するプログラムが用意されています。

参考 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: <http://presto.protein.osaka-u.ac.jp/myPresto4/>

myPresto のようにソースコードが公開されている無償ソフトには、使用料が無料であること以外にも、次のような利点があります。

- (1) 契約ライセンス数の制約を受けずに多数のコアを使った計算が可能
- (2) 多様な計算環境への導入が可能
- (3) 独自の改良を導入可能

しかし、これらの利点を活かすためには、計算機、プログラミング、シミュレーション手法等についての知識と経験が必要です。弊社は、これらの知識がないユーザーでも、目的の計算を実行できるように、計算環境構築、活用セミナー開催、プログラム開発、計算受託等の支援サービスを行っています。

弊社では、東京大学医科学研究所の HGC スパコン、公益財団法人計算科学振興財団の FOCUS スパコン、クラウドコンピューティングサービス(Amazon Web Services(AWS)、Microsoft Azure、さくらインターネットの VPS)、PC クラスタ、MacBook Pro 等、多様な計算環境で myPresto の計算環境を構築した実績があります。HGC スパコン、FOCUS スパコンを利用すれば、数百コアを使った計算でも比較的安価に実行できますが、環境に合わせてソースコードの一部を修正する必要があります。クラウドでは GPU 搭載ノードを時間借りすることも可能ですが、使用する GPU に適した設定を行う必要な場合があります。弊社は、Microsoft Azure 上に用意した Windows Server で GUI ソフトを使った創薬計算実習会を開催した経験もあり、こうした講習会開催を支援することも可能です。

現在では、myPresto を使った商用製品・有料サービスも多数存在しています。myPresto の活用を支援する商用の GUI ソフトには、株式会社情報数理バイオが開発した MolDesk と株式会社フィアラックスが開発した MF myPresto があります。また、購入後すぐに myPresto と MolDesk が使える計算機製品 MolSpace は株式会社レベルファイブから販売されています。BY-HEX LLP は、クラウドの上で myPresto を容易に実行できる AWS リソースコントローラーを販売しています。これらの製品・サービスについても紹介します。

お問い合わせ先:

株式会社バイオモデリングリサーチ

Tel: 052-720-7704

E-mail: info@biomodeling.co.jp

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

BioMoDeLing
Research