

CBI 学会 2019 年大会 スポンサー企業企画枠

主催：次世代天然物化学技術研究組合

**N<sup>2</sup>PC** Next generation  
Natural Products  
Chemistry

## 『創薬支援ソフト myPresto5』活用セミナー

日時：10月23日(水) 16:30 ~ 18:00

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 社で使われています。本セミナーでは、最新の myPresto の紹介、操作デモ等を行います。

myPresto は、薬物の作用の理解、活性分子の探索や実験結果の検討などにも利用できます。

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

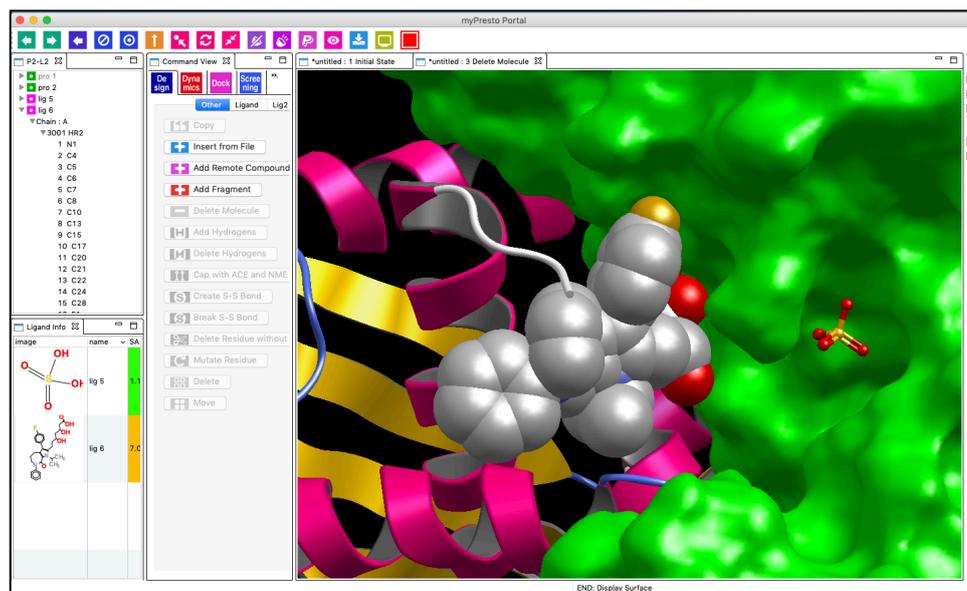
プログラム：

16:30 ~ 15:45 myPresto5 の概要紹介

16:45 ~ 17:20 myPresto5 の実行デモ

17:20 ~ 17:35 myPresto5 を実行可能な計算環境について

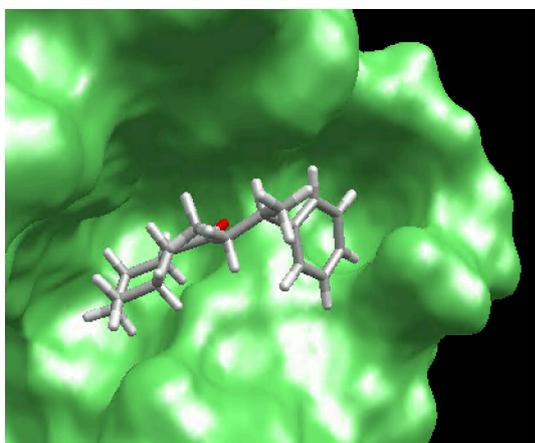
17:35 ~ 18:00 myPresto5 の活用を支援する商用サービスについて



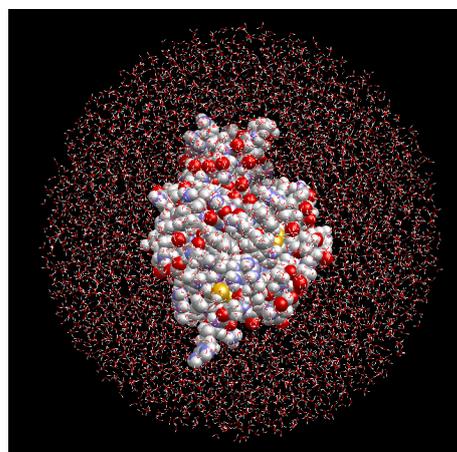
myPresto Portal の操作画面

myPrestoには、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、スパコンで大規模な計算を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)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。myPresto Portalは、Windows、Mac、Linuxで実行可能です。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。

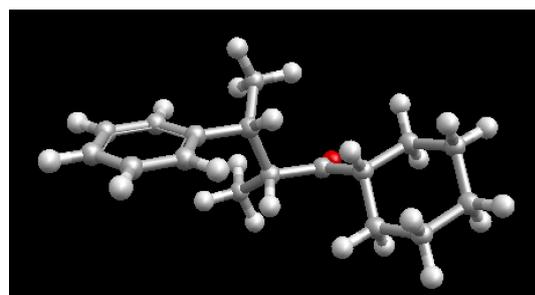
### myPresto で利用可能な機能の例



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



化合物物の2D→3D変換

参考 URL:

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

myPresto の web サイト (JBIC): <http://www.jbic.or.jp/enterprise/result/001.html>

次世代天然物化学技術研究組合: <http://www.natprodchem.jp/library.html>

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](mailto:info@biomodelling.co.jp)