

## 創薬研究におけるクラウド活用の実際 - myPresto × AWS -

クラウドのスケラビリティを活用することで、必要な時に必要な量の計算リソースを従量課金で利用することが可能となり、創薬研究の様々な場面で活用されています。本セッションでは、クラウド活用の一般論だけではなくより具体的な例として、国産の創薬向けソフトウェア群である myPresto (※1) に着目し、どのようにクラウドを活用できるのかゲストの方の講演も交えて多様な角度から実例を交えてご紹介いたします。myPresto に興味のある方だけでなく「実際のところ」の例として、クラウド活用をご検討されている方はぜひご参加ください。

### Amazon Web Services で始めるクラウド HPC

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社  
ソリューションアーキテクト 宮本 大輔

クラウドを活用することで、常に大規模な HPC クラスタを保持しなくとも、必要な時だけクラスタ環境を構築できるため、コストパフォーマンス良く大規模なバーチャルスクリーニングやゲノム解析を実施することが可能となります。本講演では AWS とはどういったものなのか、企業や大学・研究機関でどのように使い始められるのか、といった基礎的な部分から、AWS の HPC 関連サービスや国内製薬企業様でのクラウド HPC 活用事例についてご紹介いたします。

### 創薬支援ソフトウェア myPresto での膜系対応などの機能の紹介と開発の背景と今後について

産業技術総合研究所  
生命工学領域 細胞分子工学研究部門  
動的創薬モダリティ研究グループ  
主任研究員 福西 快文

myPresto は薬物インシリコスクリーニング～分子シミュレーション等を行えるフリーソフト（商用・改変・ソフト製品開発含む※2）である。近年は、膜系の自動作成、物性予測等の機能追加、Python ライブラリー化など他の市販ソフト製品との円滑な組み合わせ利用や Platypus-QM や化合物データベース LigandBox の検索システムなど本ソフト以外の保守も行き、バイオ IT の基盤整備に努めている。

### MolDesk および DataCheck サービス：myPresto システムの一例として

株式会社情報数理バイオ・次世代天然物化学技術研究組合  
計算科学グループ  
グループマネージャ 真下 忠彰

myPresto を計算エンジンとしたシステムには、GUI ソフトウェアである MolDesk（有償）、web サービスとして利用可能な DataCheck サービス（無償）などが例として挙げられる。本講演では、最近 MolDesk に導入された化合物物性予測機能・膜系自動生成機能、DataCheck サービスの既存薬ライブラリに対するスクリーニング計算機能などについて、実例を交えて紹介する。

## AWS と myPresto を用いたインシリコスクリーニング計算の実際

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

myPresto のプログラムの多くは、ソースコードが公開されており、コンパイルして使用するため、クラウドでも実行可能である。クラウドでは、必要な時に必要なだけ計算機リソースを調達できるため、計算時間や計算コストの面でメリットがある場合は多い。本講演では、myPresto でのスクリーニング計算を、EC2 や S3 等の AWS のサービスを利用して実行する際の手順、時間、計算機コスト等について紹介する。

### myPresto x AWS 開発事例のご紹介

バイヘックス有限責任事業組合

代表組合員 若林 良徳

myPresto は論文も多数発表されているオープンな創薬向けソフトウェア群の総称であり、AWS は多機能、高可用性を実現可能な様々な手段を提供している、世界で最も包括的で広く採用されているクラウドプラットフォームである。クラウド利用において、ライセンスの問題に頭を悩ませることなく計算環境を展開可能であることは、誰しもが望むところであり、本講演では、myPresto x AWS について、技術的な観点から説明を行う。

※1 : myPresto (<https://www.mypresto5.jp/>) は、次世代天然物化学技術研究組合が AMED「次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業 革新的中分子創薬技術の開発 中分子シミュレーション技術の開発」にて開発しています。

※2 : 商用利用の際は次世代天然物化学技術研究組合(<http://www.natprodchem.jp/>)までご一報ください。



AWS ヘルスケア・ライフサイエンスのご紹介ページ :

<https://aws.amazon.com/jp/health/>

お問い合わせ先 : <https://aws.amazon.com/jp/contact-us/>

