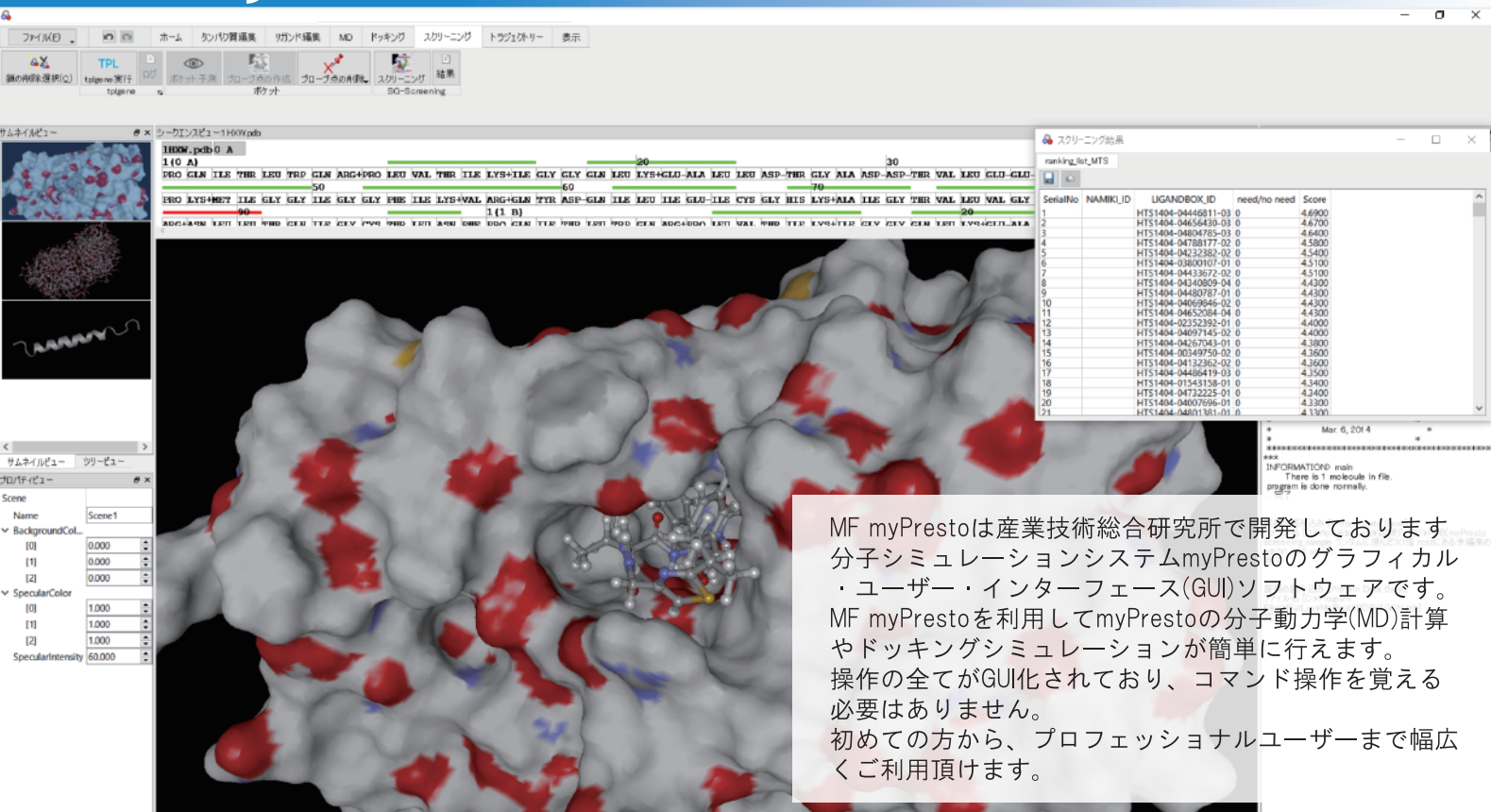


MF myPresto v3.2

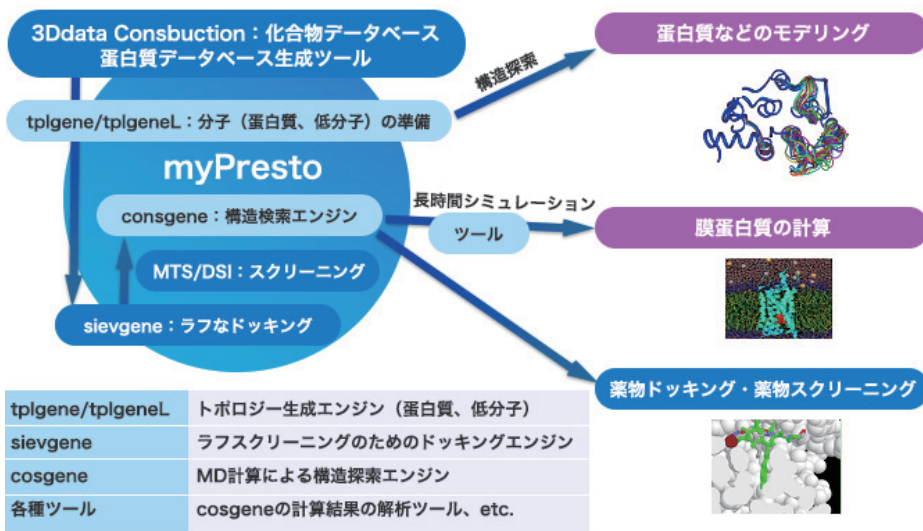


MF myPrestoは産業技術総合研究所で開発しております分子シミュレーションシステムmyPrestoのグラフィカル・ユーザー・インターフェース(GUI)ソフトウェアです。MF myPrestoを利用してmyPrestoの分子動力学(MD)計算やドッキングシミュレーションが簡単に行えます。操作の全てがGUI化されており、コマンド操作を覚える必要はありません。初めての方から、プロフェッショナルユーザーまで幅広くご利用頂けます。

myPrestoとは...

myPrestoは、AMED/経済産業省/NEDOから委託を受けて実施した「生体高分子立体構造情報解析」および「創薬加速に向けたタンパク質構造解析基盤技術開発」プロジェクトで開発した分子シミュレーションを構成するプログラム群です。

医薬品開発支援のために作成された分子シミュレーション計算のプログラム群で、化合物の二次元構造を三次元構造に変換し、タンパク質等のモデリング、タンパク質-薬物のドッキング、in-silicoスクリーニング等を従来に比べ短時間で高精度・高能率に行えます。



myPrestoの成果

下記に掲載しております。

<http://www.fiatlux.co.jp/product/lifescience/MFMYPRESTO/myPresto-result.html>

MF myPresto 導入実績

教育機関	・九州大学	様	官公庁・公的研究機関	・国立感染症研究所	様
・北海道大学	・北陸大学	様	・産業技術総合研究所	・先端医療振興財団	様
・群馬大学	・埼玉工業大学	様	・東京都医学総合研究所	民間企業	
・千葉大学	・お茶の水女子大学	様	・杏林製薬株式会社	・東レ株式会社	様
・横浜市立大学	・芝浦工業大学	様	・日産化学工業株式会社	・株式会社バイオモデリングリサーチ	様
・富山大学	・創価大学	様			
・名古屋大学	・帝京大学	様			
・名古屋市立大学	・日本大学	様			
・大阪大学	・摂南大学	様			
・大阪教育大学	・川崎医科大学	様			

■ 分子の編集機能

- ・ 分子構造のクリッピング表示
- ・ リガンドの新規作成と編集
- ・ リガンドのみの構造最適化・電荷計算
- ・ リガンドの合成容易性予測
- ・ 残基編集
Alternate location indicator の選択
主鎖原子が欠損している残基の削除
保護基の付加
SSBOND 行の追加
金属に配位する CYS を S- 解離型 CYS に置換
近接原子の補正
直行する二面角の補正
- ・ 水素原子や欠損原子の追加
- ・ 溶媒付加
- ・ カウンターイオン付加
- ・ トポロジーファイルの作成

■ エネルギー極小化計算 / MD 計算

- ・ MPI を使いローカルまたは SSH でマルチコアによる計算が可能
- ・ 計算中の構造を視覚的に確認可能
- ・ 位置拘束、原子間距離の拘束
- ・ 境界条件の設定 (球 / 楕円 / 周期境界)
- ・ 設定ファイルの保存、読み込み
- ・ リスタート計算 (MD 計算)

■ トラジェクトリ解析

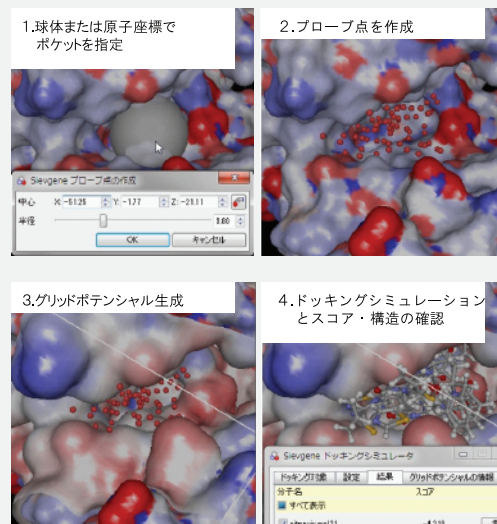
- ・ 座標トラジェクトリのアニメーション表示
- ・ 座標トラジェクトリのデータ読込・出力
- ・ 指定フレームの分子構造のファイル出力
- ・ 指定した原子の各フレームの座標 / 原子間距離 / 角度 / 2 面角 / RMSD をテキスト出力
- ・ 各フレームの水素結合の計算
- ・ エネルギーや温度のグラフ表示

■ リガンドの結合ポケットの探索

- ・ ワンクリックで結合ポケットを探索しスコアを表示

■ ドッキングシミュレーション

- ・ リガンドフレキシブルドッキング
- ・ 受容体ポケットの位置をグラフィカルに指定可能
- ・ マウスクリックによるプローブ点の削除
- ・ 複数のリガンドを一度にドッキング計算し結果を描画
- ・ ドッキングの結果のソート



■ in-silico スクリーニング

- ・ 200 万化合物を使ったスクリーニング (MTS 法 / 機械学習 MTS 法 / 機械学習 DSI 法)

動作環境

OS	Windows 7/8/8.1/10 Mac OS X 10.7 以降 Cent OS 6 Red Hat Enterprise Linux 6
CPU	Intel Core2 2.0GHz 同等以上
メモリ	2GB 以上
ハードディスク	200MB 以上 ただし計算出力用に別途数百GB
ネットワーク	Gigabit ethernet

※myPresto について

Copyright (C) 2006-2017 独立行政法人産業技術総合研究所 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
Copyright (C) 2006-2017 一般社団法人バイオ産業情報化コンソーシアム Japan Biological Informatics Consortium (JBIC)


株式会社フィアラックス

〒101-0032
東京都千代田区岩本町 1-3-3
プロスパービル 8F
Tel: 03-5822-4110 Fax: 03-3862-9190
<http://www.fiatlux.co.jp>

価格 (年間ライセンス使用料、ノードロック方式)

教育機関	v3リリースにつきキャンペーン中 5ライセンス ¥90,000 / 年 (税別)
官公庁・公的研究機関	¥360,000 / 年 (税別)
民間企業	¥540,000 / 年 (税別)

30日間無料評価版

下記でダウンロードできます。

<http://www.fiatlux.co.jp/download/download-index.html>

【販売代理店】



アトリビュート株式会社
〒108-0072 東京都港区白金3丁目17番-10-106号
TEL: 03-4405-8920 HP: <http://www.attribute-jp.com>
E-Mail: st-saito@attribute-jp.com