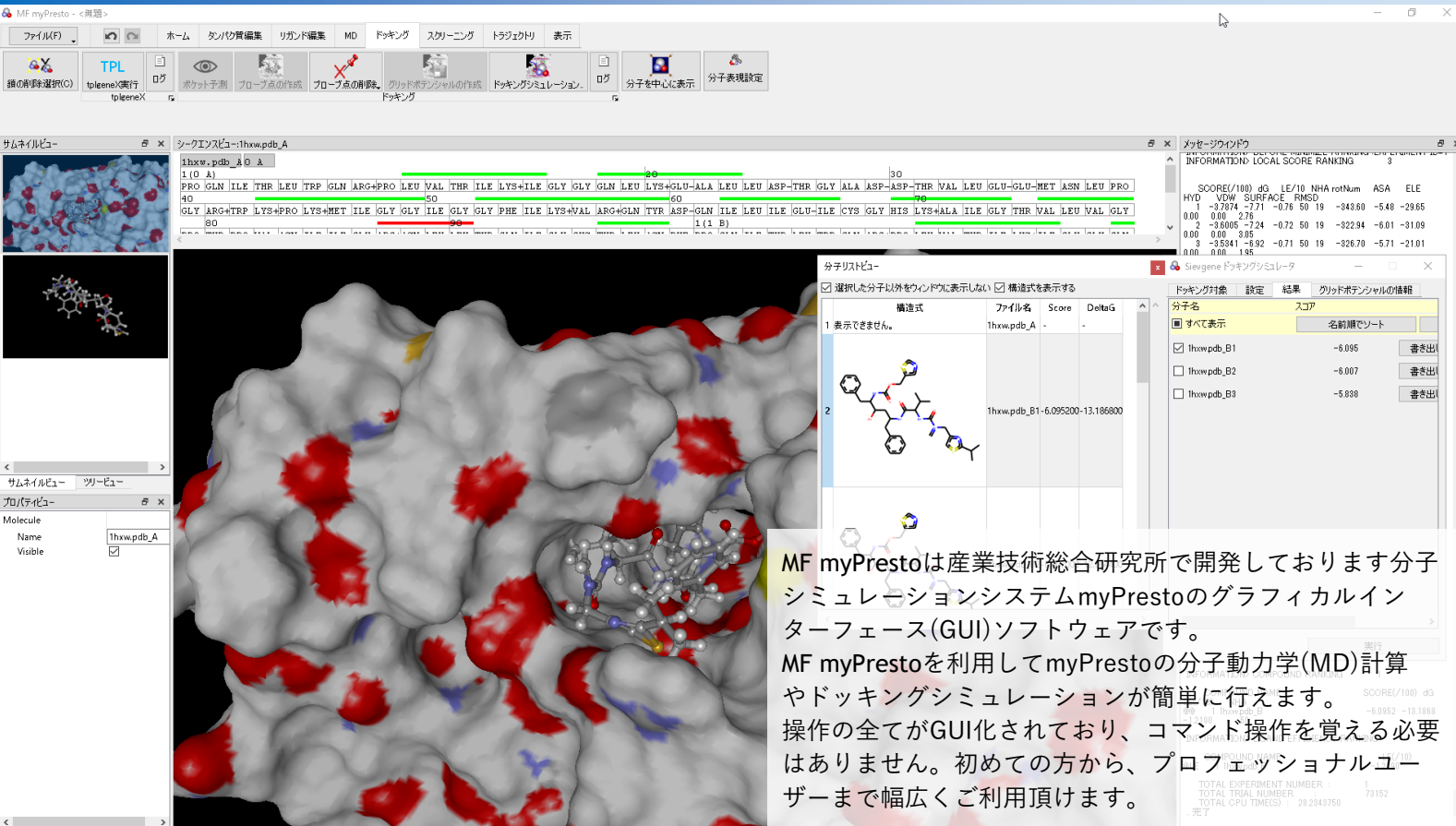


MF myPresto v3.7



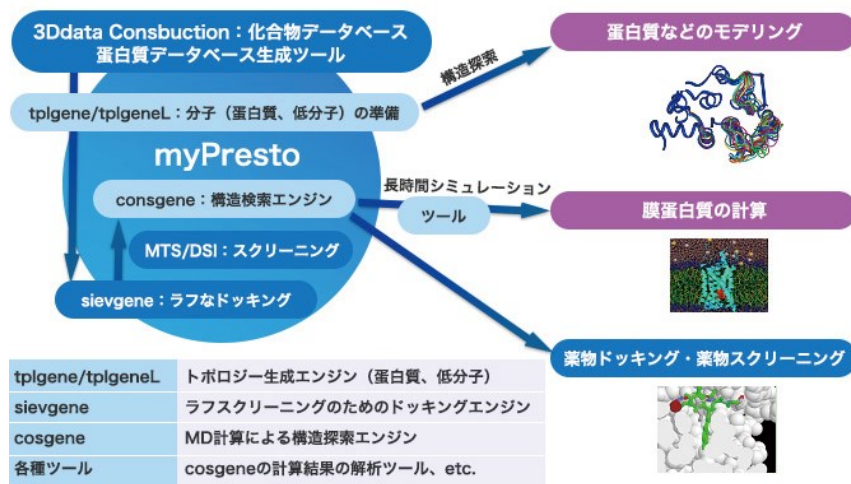
MF myPrestoは産業技術総合研究所で開発しております分子シミュレーションシステムmyPrestoのグラフィカルインターフェース(GUI)ソフトウェアです。

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・高効率に行えます。



myPresto の成果

下記に掲載しております。

<https://www.fiatlux.co.jp/product/lifescience/mfmypresto/index.html#B>

MF myPresto 導入実績

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

■ 分子編集機能

- ・PDBIDによるファイルのダウンロード
- ・原子座標の並進、回転移動
- ・原子データのコピー/カット/ペースト
- ・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
- ・リガンドの構造最適化・電荷計算(複数可)
- ・sdfのリガンドの3次元構造化(multi-mol2への変換)
- ・分子のリスト表示。リガンドの構造の表示/非表示をワンクリックで切り替える機能
- ・リガンドの2次元の構造式の表示機能
- ・SMILES記法による.smiファイルの読み書き **New**
- ・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 **Update**
- ・トポロジーファイルの作成 **Update**

■ 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でマルチコアの計算が可能
- ・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

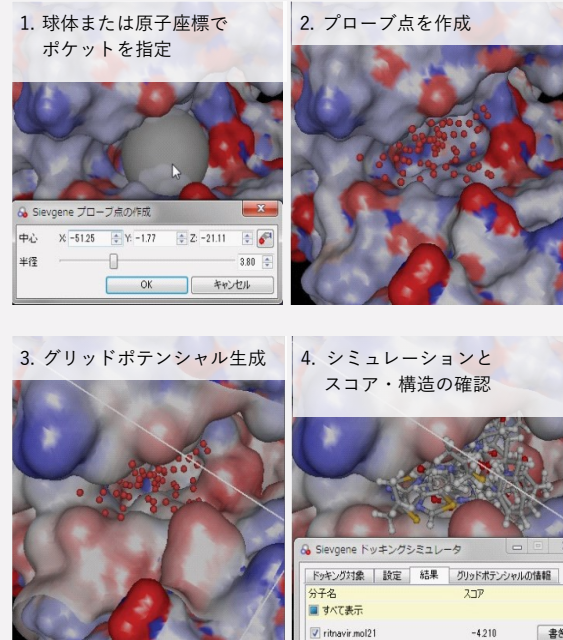
- ・座標トラジェクトリのアニメーション表示
- ・座標トラジェクトリのデータ読込・出力
- ・指定フレームの分子構造のファイル出力
- ・指定した原子の各フレームの座標/原子間距離/角度/2面角/RMSD/RMSFをテキスト出力
- ・各フレームの水素結合の計算
- ・エネルギー/温度/RMSD/RMSFのグラフ表示
- ・座標トラジェクトリのアニメーションの動画出力 **New**

■ リガンドの結合ポケットの探索

- ・ワンクリックで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1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
- ・不要な結果の削除



■ in-silico スクリーニング

- ・MTS法、機械学習MTS法、機械学習DSI法による300万化合物を使ったスクリーニング計算
- ・富岳へのジョブの投入に対応

■ リガンドの合成容易性予測

- ・myPrestoのSyntheticAccessibilityによるリガンドの合成容易性予測

■ その他

- ・表示言語の切替(英語と日本語表記に対応) **New**

動作環境

OS	Windows 10/11 Mac OS X 10.13以降 Rocky Linux 8/9 Red Hat Enterprise Linux 8/9 Ubuntu 22.04 LTS
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 © 2006-2025 国立研究開発法人産業技術総合研究所 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

Copyright © 2006-2025 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)



〒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
<https://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。
<https://www.fiatlux.co.jp/download/index.html>