

【本サーバの目的】

JBICの研究開発の成果・主に**創薬系ソフトウェアとデータ**をJBIC会員に対し、**一般公開より優先的に、配給**することを目的としています。

- ・実験系の研究者も**Google検索程度の簡易な操作で必要なデータの推算**（薬物分子・標的分子の物性や結合等）が行える機能を加える予定です。
- ・一般公開に不適な**研究用のデータ**をJBIC会員に開示する予定です。
- ・サーバーのCPU数・ディスク容量とも小さいため、**現在は主にFTPサイト**です。

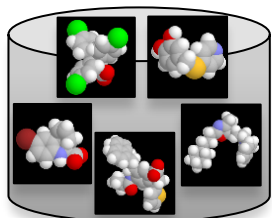
サイトは作成中で未整備な状態ですが、今後、コンテンツを追加していく予定です。

【1】myPtesto5のダウンロード方法

6ページ以降で説明します

【2】「myPtesto5」JBIC 会員専用クラウドサーバーの用途

- ・myPresto関係の数十のソフトウェアを**種類ごとに個別にダウンロード**することも**全部をまとめて一括ダウンロード**もできます。（一般公開用では、ユーザーの目的ごとに、数種類のソフトウェア一式をまとめたもののみ配給している）
- ・一般公開に不適な、**研究用のデータ**をJBIC会員に開示する予定です。



myPrestoの概要

薬物ドッキング～MDシミュレーションまでの 代表的なプログラム名

①化合物データベース : Hgene/ split_mols/
3DdataConstruction /tpl2mol2

④薬物ドッキング
Sievgene/sievgeneMVO /
siecgeneNMR

③薬物結合部位予測
MolSite / sitegene

②分子シミュレーション
tplgeneX / tplgeneL /set_water/ add_ion /
membgene
Cosgene / pysgene
GROMACS <-> myPresto ファイル変換ツール

⑥類似化合物探索
Select_DSI
MVO_screening

⑤薬物スクリーニング
Select_MTS
Doccking_scoreQSAR (modelgene)

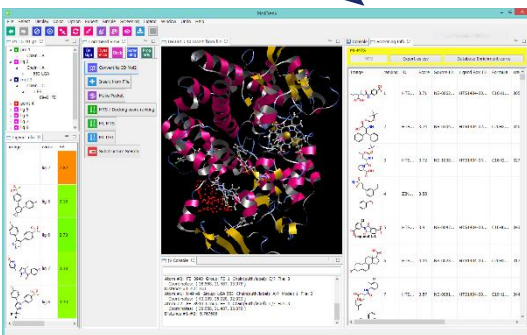
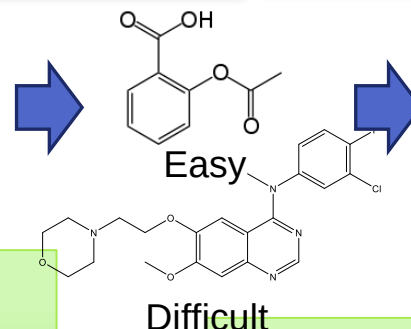
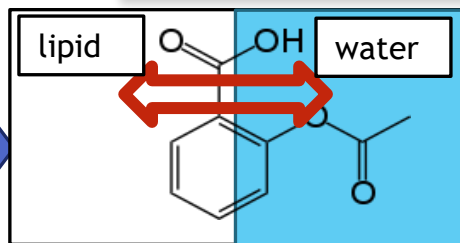
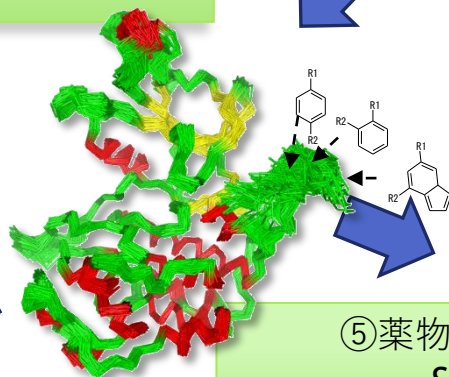
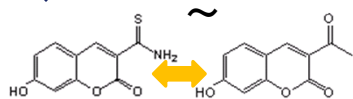
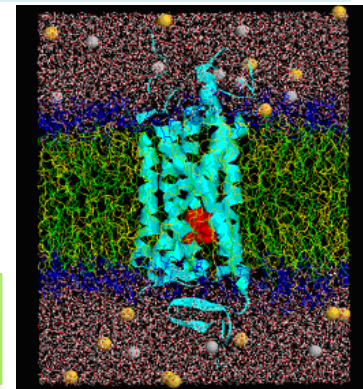
① 薬物候補物質の探索

②薬物の最適化

⑦分子設計 EditMol
Confgene / confgeneL

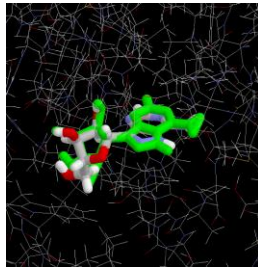
⑧溶解度など物性予測
LogS_predictor
PropPred/descgene/
modelgene

⑨合成可能判定
Synthetic_accessibility

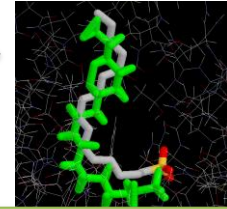
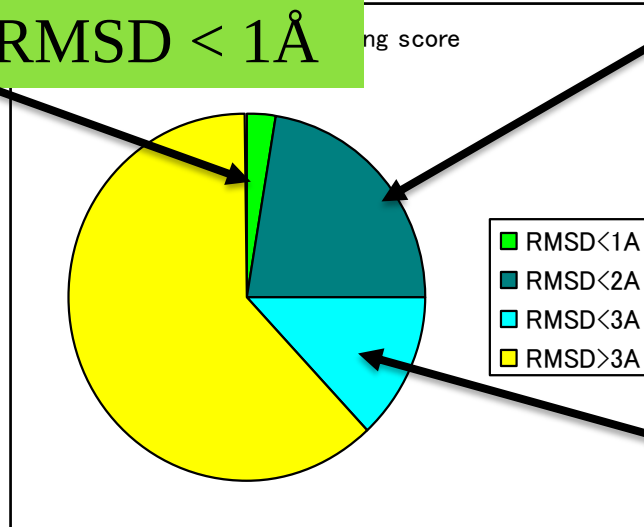


1.ドッキングソフトの精度

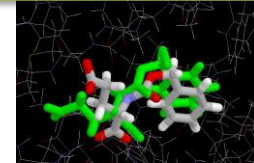
構造の予測精度: 25%



RMSD < 1Å



RMSD < 2Å



RMSD < 3Å

2.活性予測の精度

誤差 1~3 kcal/mol

手法と情報の精度に依存

3.薬物スクリーニングソフトの精度

ヒット率 3~5%程度

天然の基質が存在する場合

4.タンパク質薬物結合ポケット予測ソフトの精度

80%程度

5. MDシミュレーションの速さ

myPrestoで系を作成しGROMACSで計算する場合10-30ns/day (数万原子)

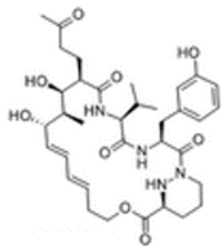
6. 利用可能な力場

ff99/ff99SB/ff99SB-ILDN/OPLS/OL3/OL15/GAFF等

簡易な操作でデータ推算（薬物分子・標的分子の物性や結合等）する機能

ユーザーがPCのWebブラウザから、試薬・標的の構造データをマウスでコピー・ドラッグするだけで、立体構造生成、物性予測、薬物ドッキング、薬物スクリーニング、MDを自動計算

注意：サーバーのCPU数・ディスク容量とも小さいため、現在は処理速度が非常に遅いため、改良後、会員向けアクセス可能とします



ユーザーの分子構造
ファイルのチェック

Compound

☐ SMILES

☒ SDF/Mol2

Drag and Drop a SDF/Mol2 file.

multi28.mol2 uploaded. file size: 90.63 KB (92803 byte)

Protein

☒ PDB

Drag and Drop a PDB file.

pdb6lu7.ent uploaded. file size: 234.14 KB (239760 byte)

Active Site

☒ Site residue ID list

A42,A146

point.pdb uploaded. file size: 2.34 KB (2397 byte)

薬物ドッキング計算

薬物スクリーニング計算

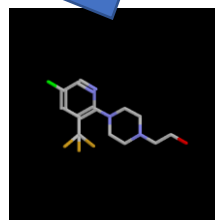
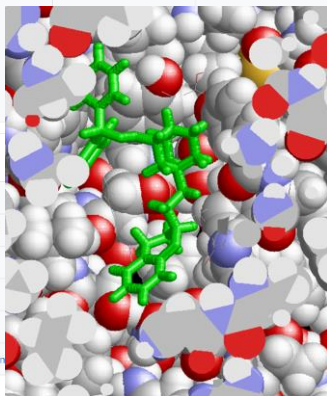
ユーザーの分子の物性推算

Docking Simulation status: Complete

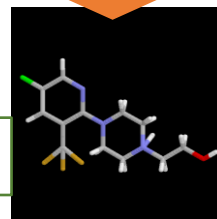
Target	Action	Status	Result file
C	Check	OK	3dbuild.mol2
P	Check	OK	pro.pdb
P	Check	OK	pro.cor
C, P, A	Docking	OK	docking.mkf
C, P, A	Docking	OK	docking_rankin

C(ompound), P(rotein), A(ctive)

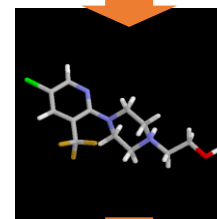
MSBIO, June, 2020



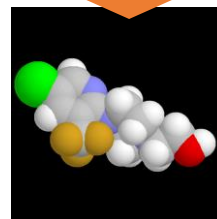
ユーザーの
分子構造ファイル
・ 2次元平面構造



- ・ 水素原子の付加
- ・ 芳香族環の判定
- ・ 原子タイプの判定



- ・ エネルギー的に安定な
立体構造の発生
- ・ 光学異性体の発生



- ・ 量子化学計算による
原子電荷発生
- ・ mol2ファイル形式へ変換
- ・ データベース化

【myPresto5のダウンロード方法】

(1) myPrestoのダウンロード方法

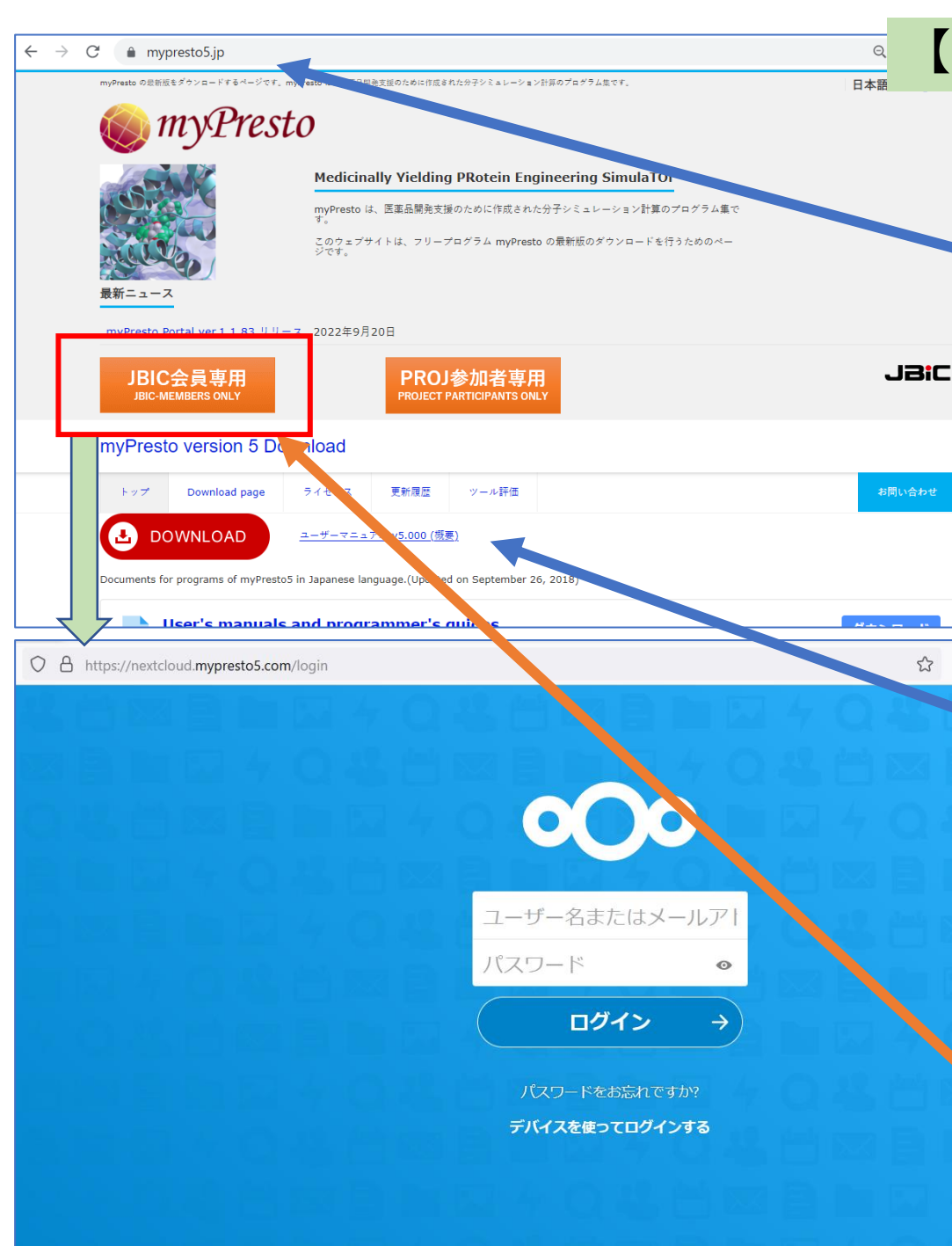
<https://www.mypresto5.jp/>

が正式なURLになります。

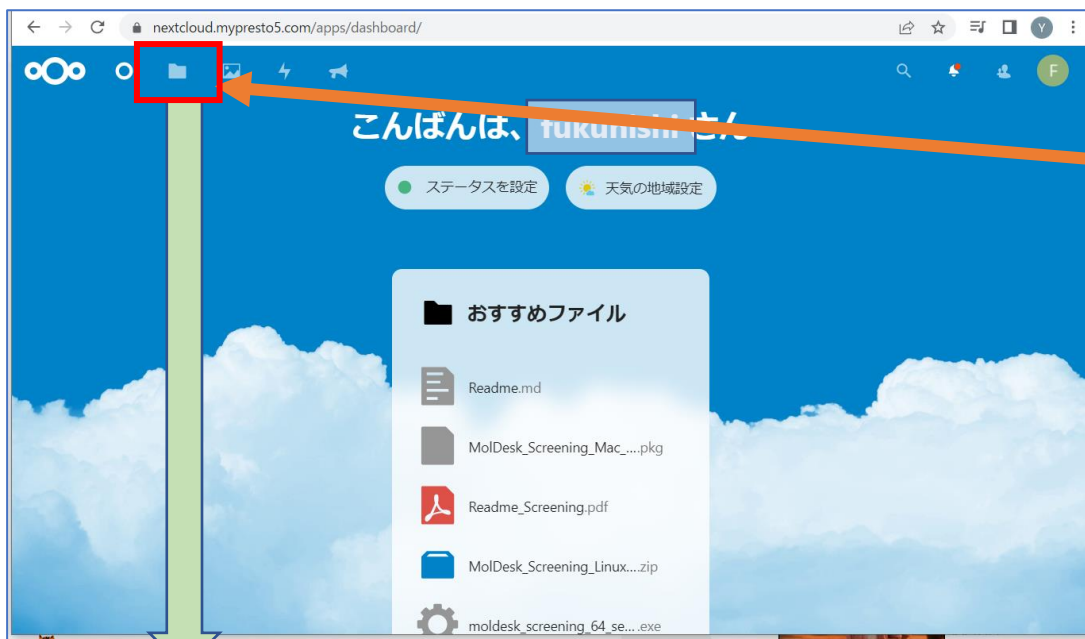
Googleなどの検索エンジンで「mypresto」で検索すれば、通常、検索結果のトップに出てきます。

ホームページで各ツールの説明があり、機能・名称・整備状況・信頼性などがまとめられています。このままユーザー登録して、ダウンロードページから、**一般公開用のmyPresto (LGPL版)**を入手することもできます。

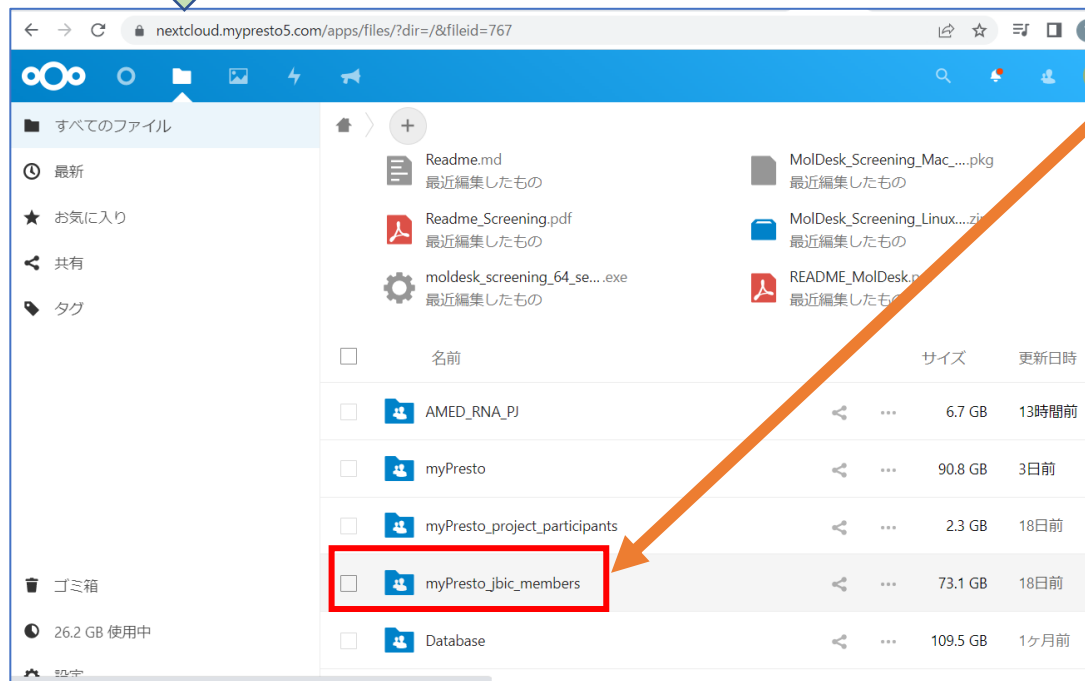
(2) **JBIC会員**は、myPresto5のホームページの「**JBIC会員専用**」のボタンを押し、配布された**ユーザー名**＋**パスワード**で**ログイン**できます。



(3) JBIC会員専用(<https://nextcloud.mypresto5.com/>)は一般公開用と異なります。



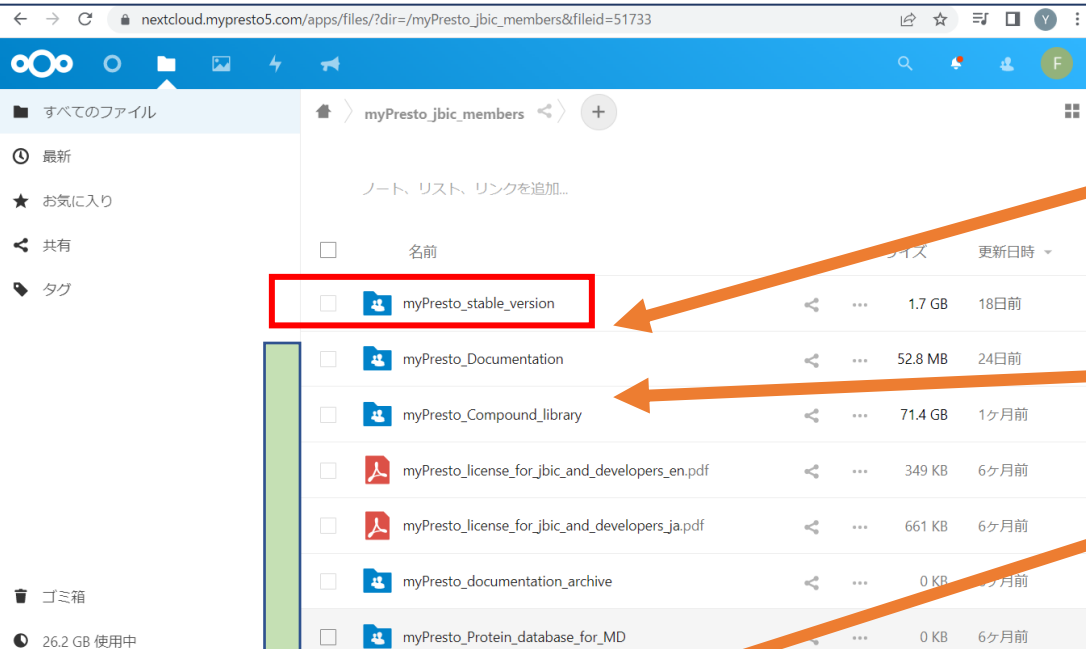
(4) 「JBIC会員専用」画面で画面左上「ファイル」を選択すると、 データベースの個々のファイルがダウンロードできる画面になります。



(5) 「myPresto_JBIC_members」に、を選びます。
ここで会員用の**FreeBSD**版がダウンロードできます。

「myPresto_published」は、一般公開用の**LGPL**版になります。

「myPresto_project_participants」は、現在、JBICの行っている研究プロジェクトの参加者用です。



(6) 「myPresto_stable_version」で各種のソフトウェアをダウンロードできます。

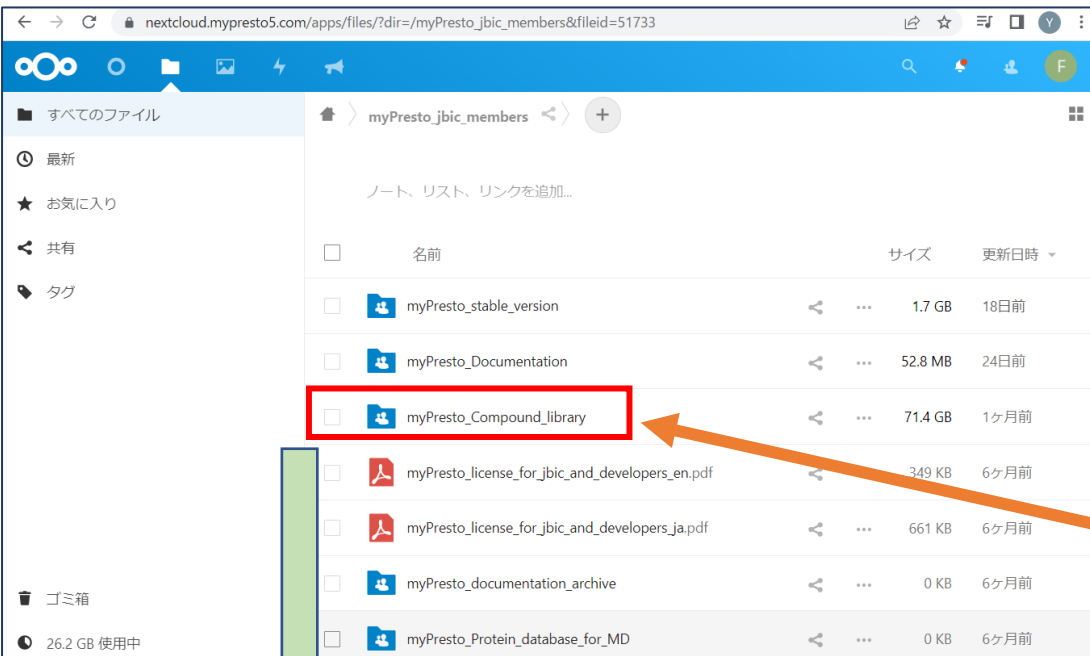
「myPresto_Documentation」画には、マニュアル類をダウンロードできます。

☐ チェックボックスをクリックし、
「…」にマウスを置き、右ボタンを
押し「ダウンロード」を選択すると、
端末にダウンロードできます。



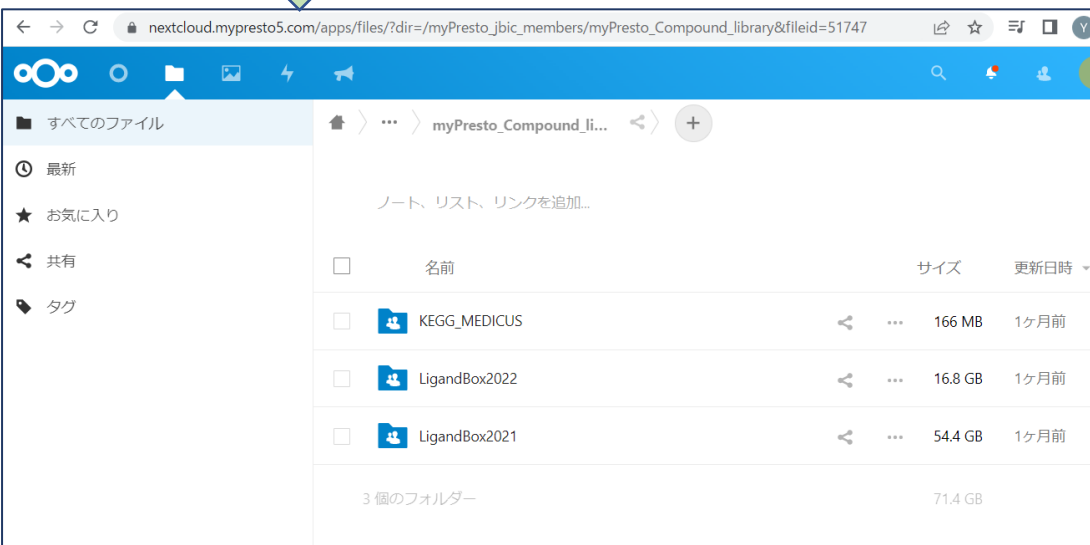
① 個々のファイルを1つずつダウンロードでき、

② フォルダーごと、まとめてダウンロードすることもできます (zip圧縮される)。



(7)
「myPresto_Compound_library」

で化合物データベースをダウンロードできます。



本FTPサイトは、作成中ですので、まだ未整備な状態ですが、今後、コンテンツを追加していく予定です。