

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

<http://www.mypresto5.com/web/cgi-bin/input.cgi>

<https://www.moldesk.com/>

2020/10/29

(株)情報数理バイオ

真下 忠彰



IMSBIO

次世代天然物化学技術研究組合

<http://www.natprodchem.jp/>

次世代天然物化学技術研究組合とは

創薬企業等が協力して天然物による創薬研究を推進するため、優れたライブラリーを保有する企業が集まって2011年に設立されました。本組合では、これらの天然物ライブラリーを統一的に保管・管理し、組合員企業間及びアカデミアによる相互利用を推進することにより、日本の天然物創薬の発展に貢献することを目標としています。また、我が国の医療分野の研究開発及びその環境整備の中核的な役割を担う機関として2015年4月に発足した国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED)の次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業に参画することで、我が国における医薬品開発の基盤技術開発に貢献しております。

お知らせ

2019/07/02	「第9期通常総会」議事録を掲載しました。
2019/06/18	「組合の概要」を更新しました。
2019/06/29	「第9期通常総会」の資料及び、議決権行使票、委任状などのフォームを掲載しました。
2019/04/10	「第9期通常総会」予定及び第8期第1回臨時総会」議事

- 天然物による創薬研究を推進

- 医薬品開発の基盤技術開発

- 国家プロジェクトに参画
AMED「次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発(革新的中分子創薬技術の開発)」など

- **創薬支援ソフトウェア myPresto の開発/公開**
バイオITに関わるIT・製薬・農薬・食品企業、研究機関が会費制で運用

- その他(寄贈ソフトウェア・データなどの維持管理)
ナミキ商事様・キシダ化学様(化合物カタログ)
大阪大学 川端猛先生(データベースシステム)
NEC様(量子化学ソフトウェア Platypus-QM、ベクトル化コード)



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

myPresto の最新版をダウンロードするページです。myPresto は、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集です。

日本語 English

myPresto

Medicinally Yielding PROtein Engineering SimulaTOr

myPresto は、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集です。

このウェブサイトは、フリープログラム myPresto の最新版のダウンロードを行うためのページです。

株式会社 情報数理バイオ

<https://www.imsbio.co.jp/>

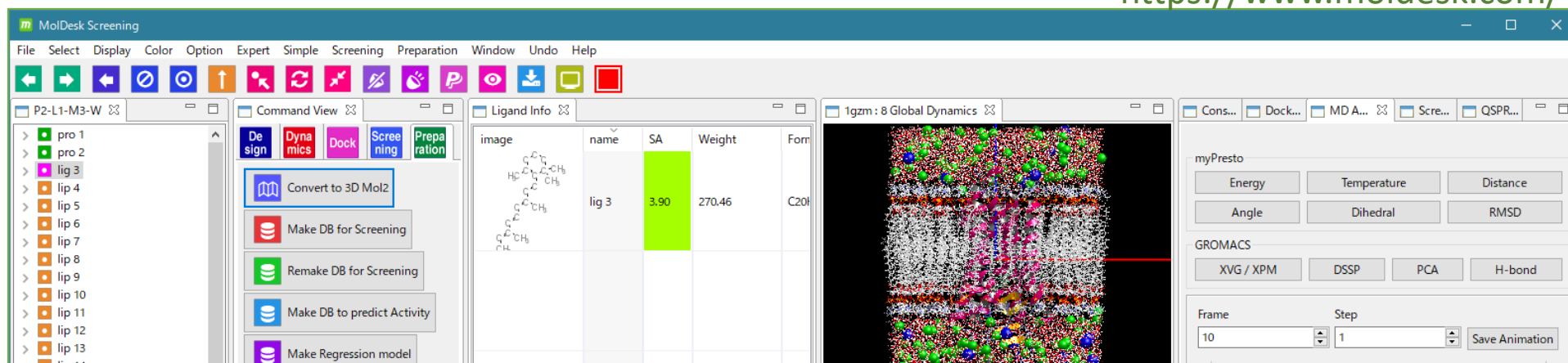


- 2011年10月4日設立
 - 代表取締役 三十尾 潔高
- 情報科学・数理科学・生命科学・計算科学に関する受託開発業務
- ソフトウェアの開発・販売
 - **myPresto**のGUIソフトウェア MolDesk (Basic, Screening)



MolDesk

<https://www.moldesk.com/>



内容ーmyPrestoを簡単に利用できるー

1. MolDesk(有償)のご紹介
 - ① MolDeskの概要
 - ② MolDeskの機能例(物性予測・膜系生成)
2. DataCheckサービス(無償)のご紹介
3. まとめ
4. 謝辞



MolDeskScreening

Easy MD

操作ボタン:

各状態・分子について実行可能な操作のみ表示

合成容易性:

自動計算で表示

MD計算支援:

系の設定からMIN/MDまでを自動実行

The screenshot displays the MolDeskScreening software interface. On the left, a list of ligands (lig 1 to lig 9) is shown with their chemical structures and associated values (SA, deltaG). A color-coded bar indicates the synthesis ease (SA) for each ligand, ranging from green (high) to red (low). The central panel shows a 3D molecular model of the ligand bound to the protein. The right panel displays the 'Screening Info' tab, which includes a table of standard output data and a 'jv Console' window showing the execution status of the MD simulation.

Standard Output	RESIDUE NAME	RESIDUE ID	ATOM NAME	DISTANCE
A A LPD LPD	2278	2279	DISTAN	
A A LPD LPD	2292	2293	DISTAN	
A A LPD LPD	2306	2307	DISTAN	
A A LPD LPD	2315	2316	DISTAN	
A A LPD LPD	2320	2321	DISTAN	
A A LPD LPD	2321	2322	DISTAN	
A A LPD LPD	2332	2333	DISTAN	

WARNING: TOPOLOGY FILE NOT EXIST: C99_aa.tpl
SKIP RESIDUE ANALYSIS
INFORMATION: OUTPUT
separate.pdb

Coordinates: { 4.846, 1.965, 191.710 }
Distance #1-#2: 0.0
Atom #1: C12 12 Group: LGD 282 Chain(auth/label): A/? Model: 1 File: 2
Coordinates: { 4.846, 1.965, 191.710 }
Atom #2: C12 12 Group: LGD 282 Chain(auth/label): A/? Model: 1 File: 2
Coordinates: { 4.846, 1.965, 191.710 }
Distance #1-#2: 0.0

GPCR: ムスカリン性アセチルコリン受容体M3
リガンド: (R)-メペンゾラート(M3アンタゴニスト)

抗炎症作用をあわせ持つCOPD(慢性閉塞性肺疾患)
治療薬探索を目的とした分子動力学計算



IMSBIO



MolDeskScreening

Easy Docking

ポケット探索機能:
MolSite法(高精度)

ドッキングNMR:
NMR実験データを利用
(DIRECTION法)

ドッキング支援:
系の準備からドッキング
まで自動実行

Command View

- Design
- Dynamics
- Dock
- Screening
- Property

Find Pocket

Select Receptor Molecule

Docking

Docking NMR

Auto Docking

Standard Output

```
85 -279.3969
86 -279.3968
CLUSTER 9 SCORE= -327.903 STRUCTURES= 8
55 -293.3452
97 -275.0439
98 -275.0438
99 -275.0437
CLUSTER 10 SCORE= -293.345 STRUCTURES= 4

INFORMATION> AFTER MINIMIZE RANKING
INFORMATION> AFTER MINIMIZE RANKING : EXPERIMENT
INFORMATION> LOCAL SCORE RANKING
10

COMPOUND NAME : inpl.mo12
FILE NAME : Lig.mo12

SCORE(/100) dg LE/10 NMA rotlum ASA
@ 1 -3.6507 -9.61 -1.33 29 6 -346.50
@ 2 -3.8156 -9.39 -1.32 29 6 -356.73
@ 3 -3.7928 -9.49 -1.31 29 6 -339.23
@ 4 -3.7906 -9.09 -1.31 29 6 -362.17
@ 5 -3.1998 -7.64 -1.10 29 6 -302.69
@ 6 -3.4759 -8.32 -1.20 29 6 -331.04
@ 7 -3.4654 -8.20 -1.19 29 6 -332.34
@ 8 -3.0242 -7.26 -1.04 29 6 -279.91
@ 9 -3.2790 -7.80 -1.13 29 6 -310.83
@ 10 -2.9335 -6.89 -1.01 29 6 -277.01

REFERENCE COORDINATE DATA
-290.42 -282.60 0.00 -7.82

INFORMATION> ALL EXPERIMENT FINISHED

INFORMATION> COMPOUND RANKING
1

COMPOUND NAME
1 inpl.mo12

INFORMATION> LIGAND EFFICIENCY RANKING

COMPOUND NAME
1 inpl.mo12

TOTAL EXPERIMENT NUMBER : 1
TOTAL TRIAL NUMBER : 343
TOTAL CPU TIME(S) : 137.4230
INPUT : 0.9480000
GRID : 12.37300
CONF : 3.0003548E-02
DOCK : 114.7670
MIN : 8.737000
```

キナーゼ:上皮成長因子受容体(EGFR)
リガンド:エルロチニブ(チロシンキナーゼ阻害剤)

上皮成長因子受容体 (EGFR) のチロシンキナーゼを選択的に阻害するエルロチニブのドッキング計算



IMSBIO



MolDeskScreening

Easy Screening

SBDD:
MTS法・機械学習MTS法

LBDD:
機械学習DSI法

構造探索:
部分/類似構造探索



HP-Z840 workstation:

- Intel Xeon E5-2699 v3 @ 2.30GHz 2CPU
- 64GiB RAM
- CentOS 6.7
- 72 thread
- LigandBox2015 (200万化合物)
- avg 6:39:21, sd 0:05:29



IMS BIO

The screenshot shows the MolDeskScreening software interface. The central window displays a 3D ribbon model of a protein structure. To the left, a sidebar contains various tools and options, including 'Convert to 3D Mol2', 'Insert from File', 'Make Pocket', 'Find Pocket', 'Select Receptor Molecule', 'MTS / Docking score ranking', 'ML-MTS', 'ML-DSI', 'Topology Graph Similarity', and 'Substructure Search'. To the right, a table lists screening results for the COX2_MTS_result. The table has columns for rank, ID, Score, and Source ID. A callout box points to the 'Export as csv' button in the table's header.

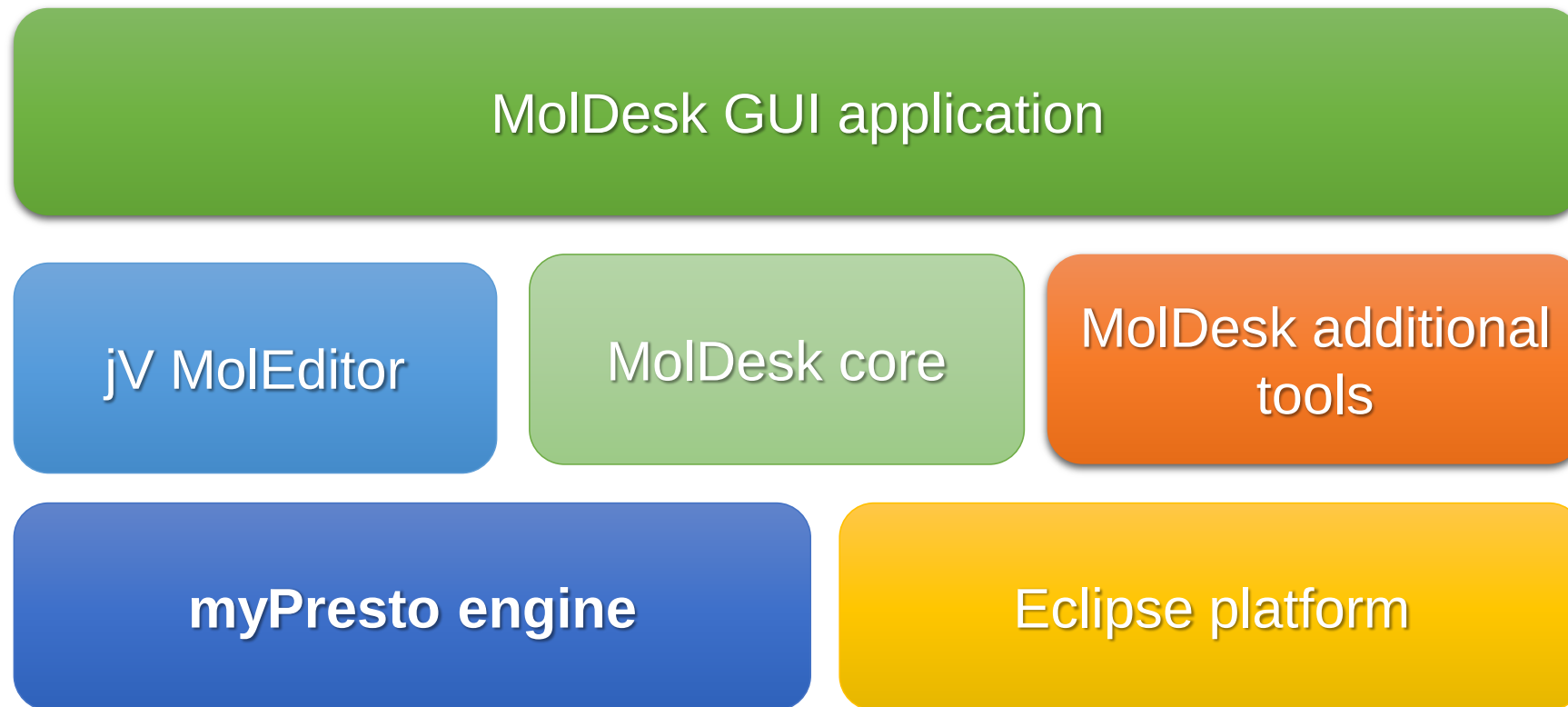
rank	ID	Score	Source ID
1	HTS1404-04326943-02	4.71	NS-10278135
2	HTS1404-04320832-03	4.62	NS-10271650
3	HTS1404-003211		
4	HTS1404-00349605-02	4.49	NS-00488718
5	HTS1404-04534297-02	4.45	NS-10563066
6	HTS1404-00724014-02	4.41	NS-00949811
7	HTS1404-03702991-01	4.4	NS-06473265

化合物購買リストの
作成機能

エンザイム: シクロオキシゲナーゼ2 (プロスタグランジン合成酵素)
リガンド: LigandBox (200万化合物ライブラリ) からスクリーニング

プロスタグランジン合成酵素のシクロオキシゲナーゼ2を
(選択的に) 阻害する化合物のスクリーニング計算

MolDesk内部構造



IMSBIO

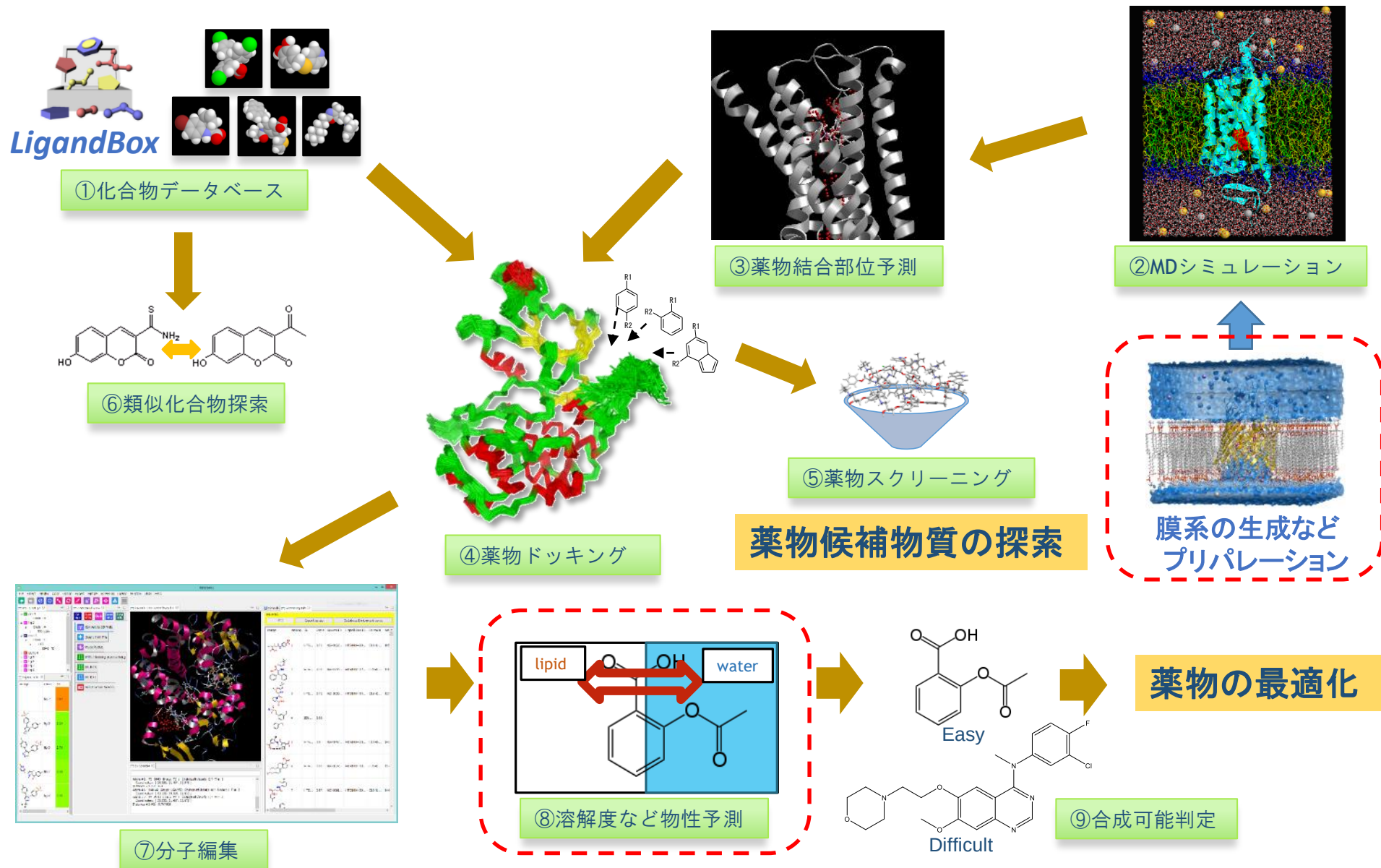
MolDesk GUI : 簡便なユーザインタフェース

各機能 : コア、3D表示・編集 (jV) および追加ツール

myPresto engine : エンジンとしてmyPrestoを利用

Eclipse platform : JavaVM上で動作 (windows, macOS, linux)

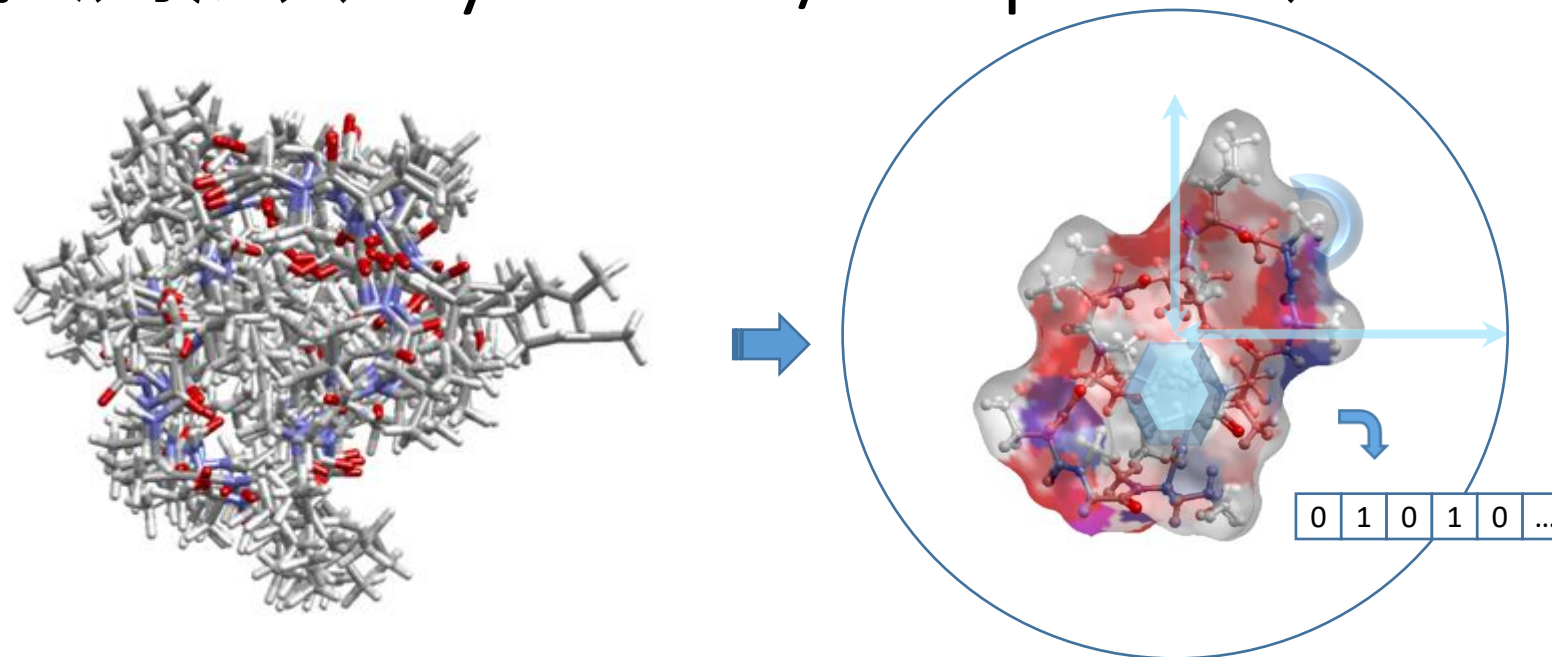
myPrestoシステムの概要



内容ー myPrestoを簡単に利用できるー

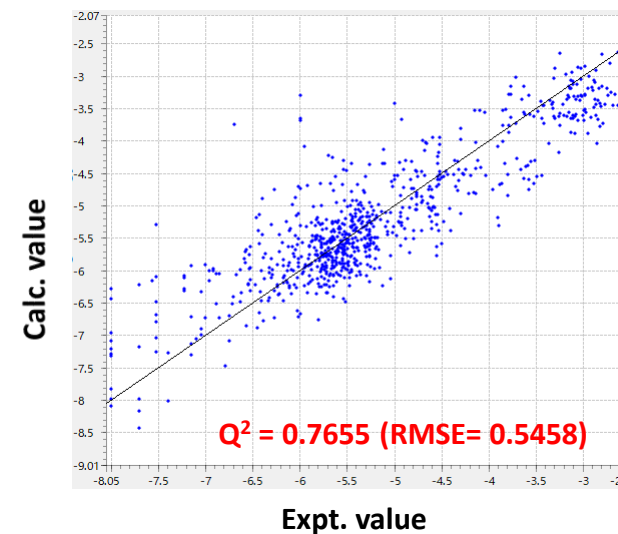
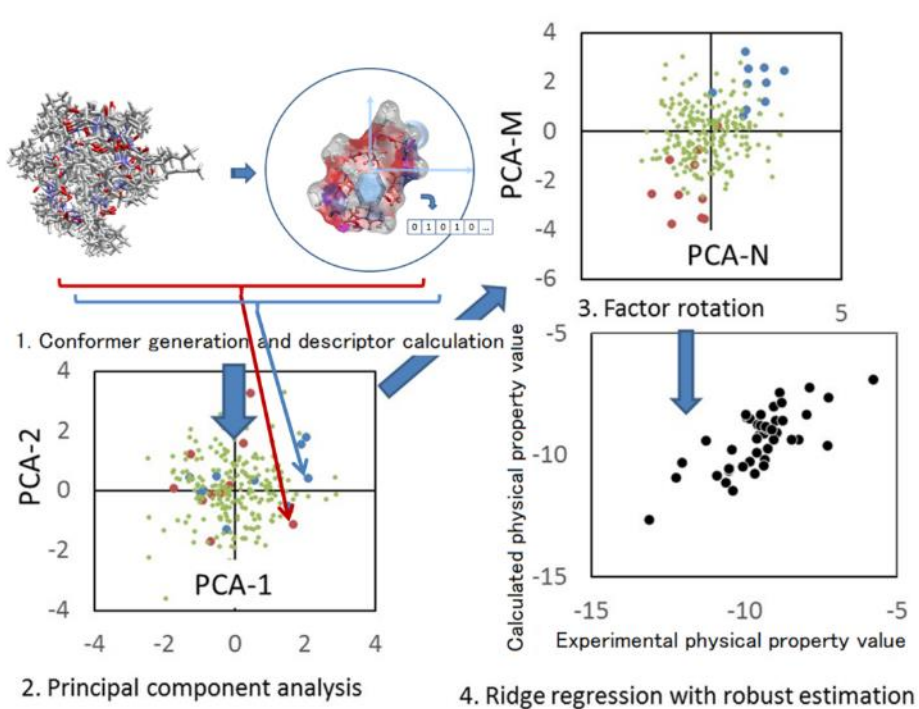
1. MolDesk(有償)のご紹介
 - ① MolDeskの概要
 - ② MolDeskの機能例(物性予測・膜系生成)
2. DataCheckサービス(無償)のご紹介
3. まとめ
4. 謝辞

物性予測法 (myPresto/PropPred)



- 化合物の各種物性値 (LogD/**LogPapp**/LogSなど) を推算する手法
- 配座生成を行った後、物理化学/構造記述子を計算して回帰分析
- 回帰対象物性値は文献およびChEMBLなどの公開DBより取得

物性予測法の回帰モデル



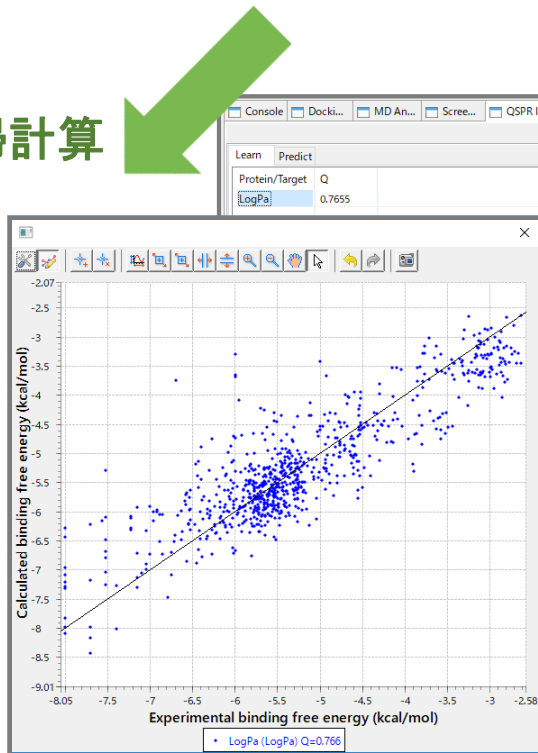
LogP_{app}(PAMPA)

CHEMBL905612	97
CHEMBL905613	70
CHEMBL1034536	127
CHEMBL3430217	55
CHEMBL3431937	389
Astellas pharma inc.	57
Total	795

- 正規化項を伴った記述子ベースの重み付きPCRで回帰モデルを構築
- ロバスト推定(M推定)を使用して、外れ値の影響を抑制
- 膜透過速度LogP_{app}に対する適用において $Q^2 = 0.7655$ (RMSE = 0.5458)

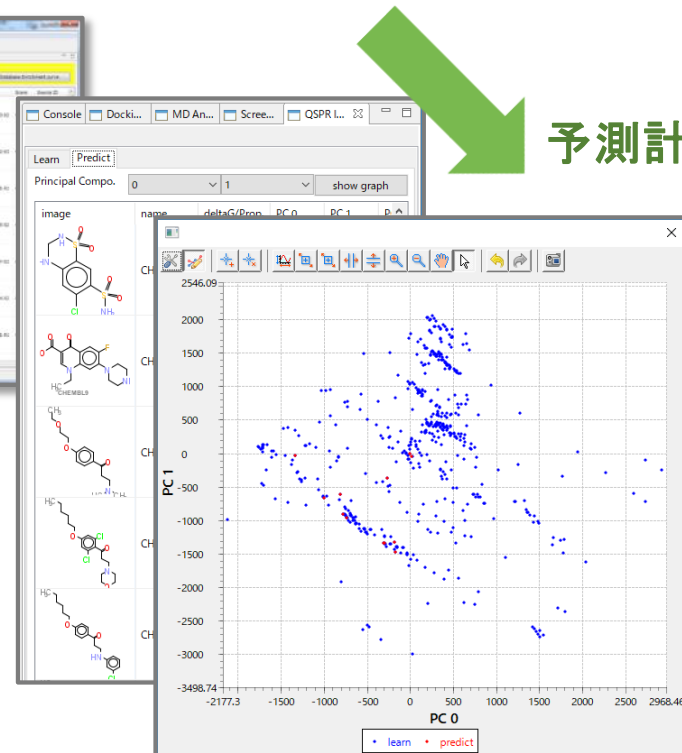
MolDeskへの導入

回帰計算



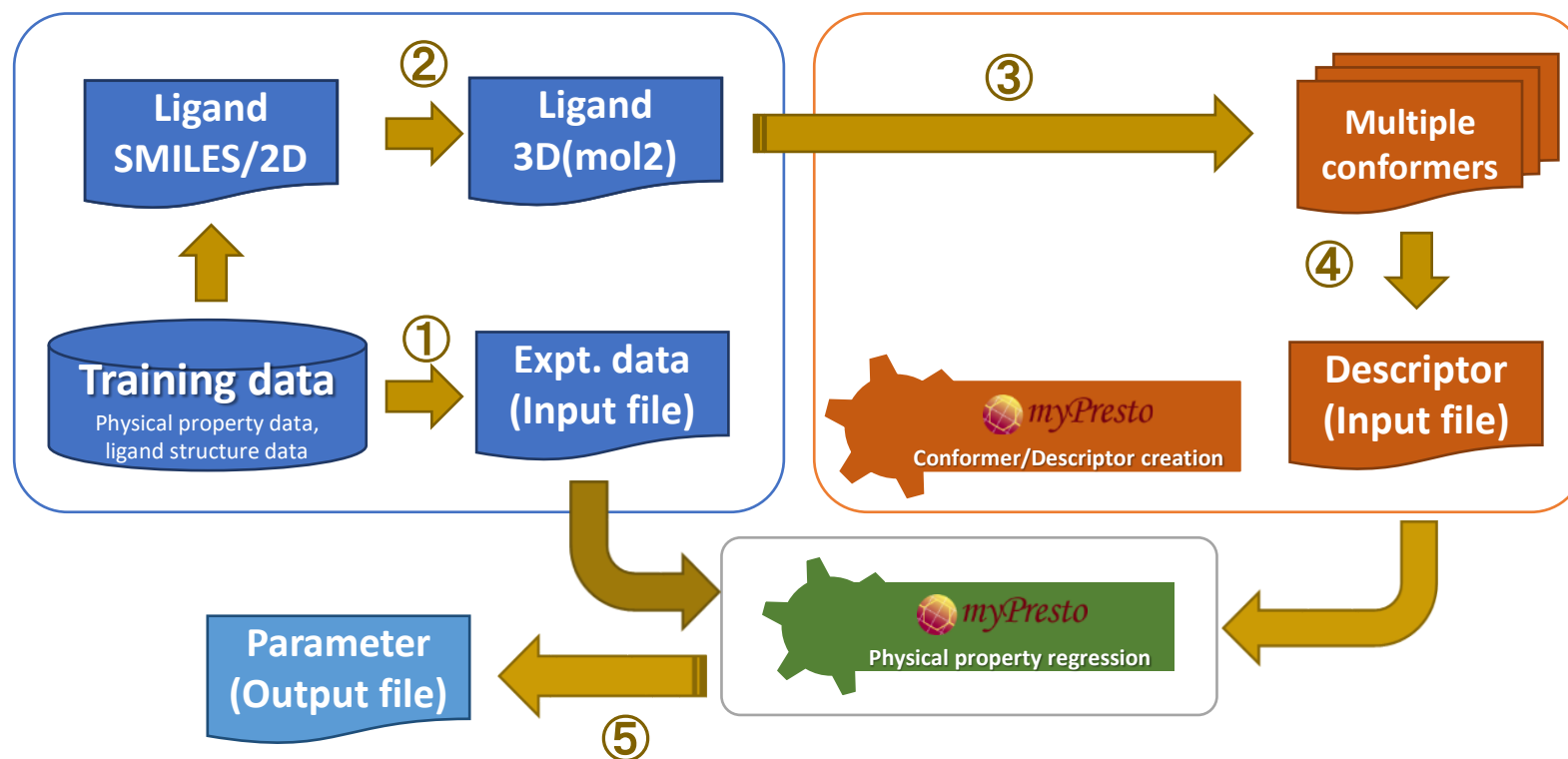
olDesk

予測計算



- 物性予測法の回帰計算機能および予測計算機能を実装
- 実験値－計算値の相関図および指定した主成分軸での散布図を作成
- 散布図上で予測結果の確認が可能

物性予測法回帰手順



- 実験データ(物性値)の用意－①、3D分子構造データの用意－②
- 配座生成－③、記述子生成－④
- 物性予測法による回帰(パラメータファイル生成)－⑤

物性予測法：回帰の実例①

Make Regression model

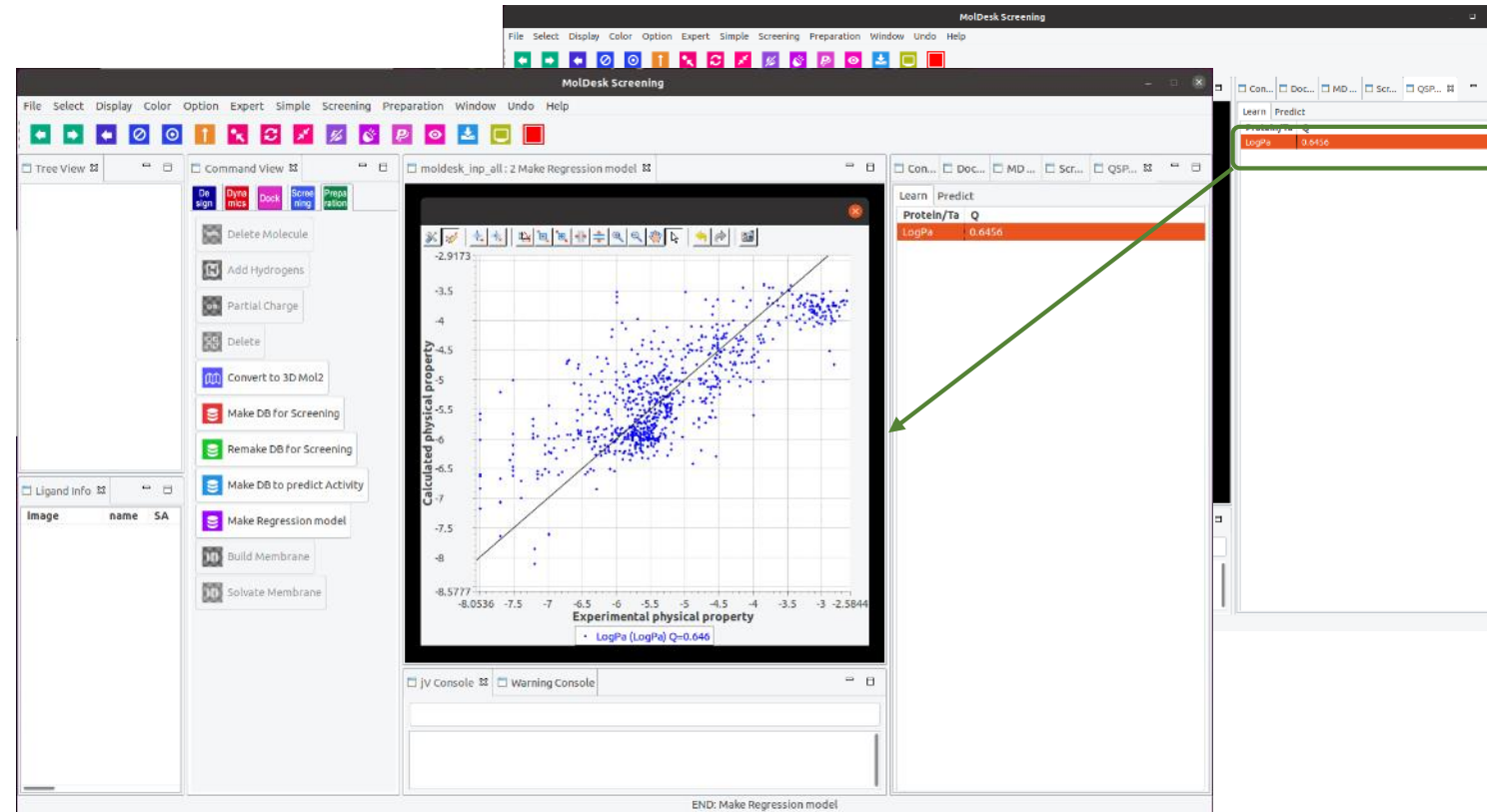
① 実験データ(物性値)の指定

② 3D分子構造データの指定

⑤ 物性予測法による回帰

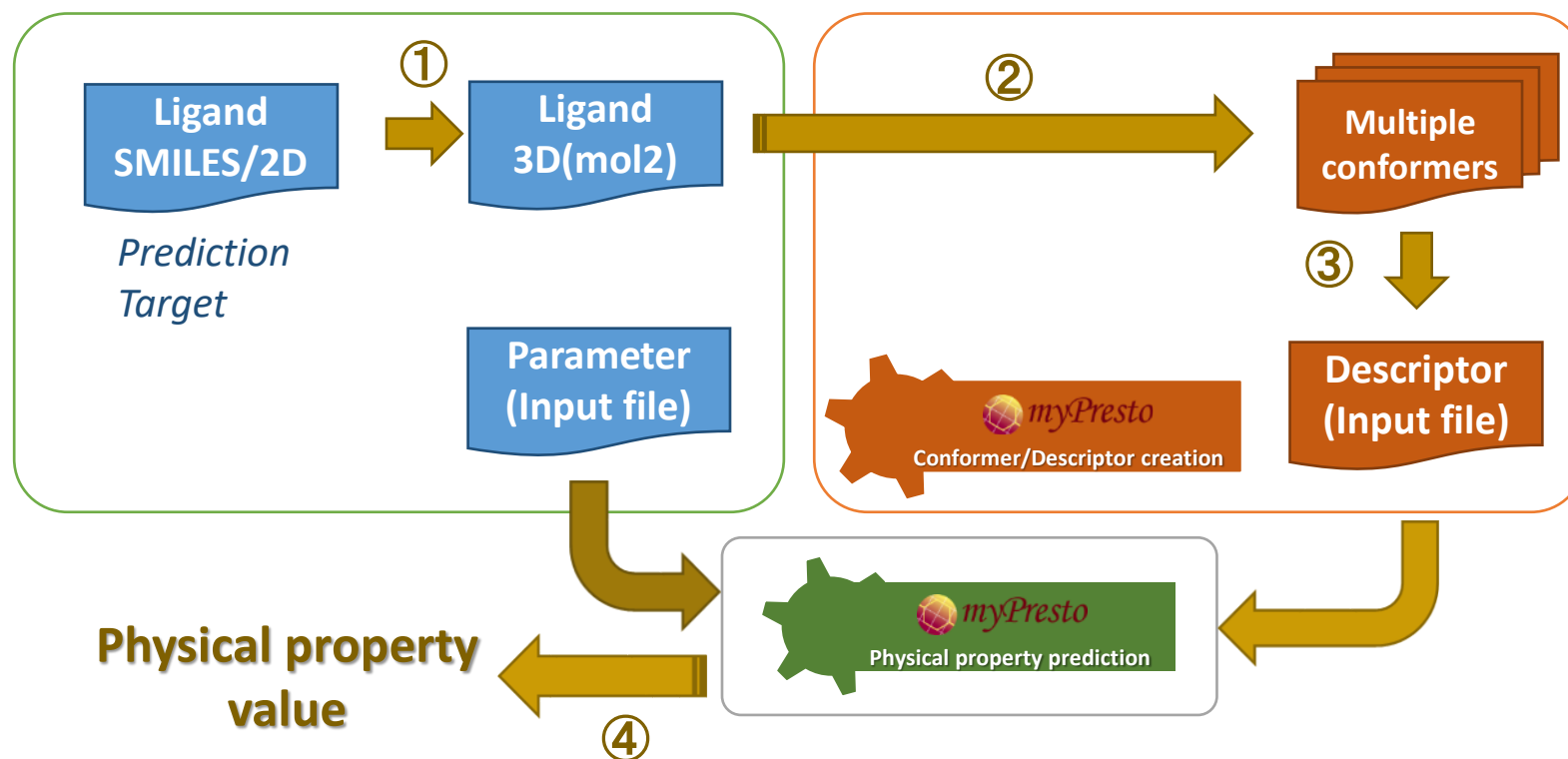
- ダイアログ上で実験データ(物性値)の指定—①、3D分子構造データの指定—②
- OKボタンで物性予測法による回帰(パラメータファイル生成)—⑤

物性予測法：回帰の実例②



- 回帰結果リストより相関図(計算値—実測値)を確認可能
- 回帰モデル(パラメータファイル)は、プロジェクト内のworkディレクトリに格納

物性予測法予測手順



- 標的化合物の3D化—①
- 配座生成—②、記述子生成—③
- 物性予測法による物性値推算—④

物性予測法：推算の実例①

Predict with Regression model

PCA parameter /home/user/develop/propred_dev/moldesk_inp_all/work/regression/regression.param select

Learn stdout /home/user/develop/propred_dev/moldesk_inp_all/work/regression/learn.out select

Input Mol2 Files /home/user/develop/propred_dev/PropPred_191220/sample/mol2/PDB_LIGAND-00004268-01.mol2 select

Cancel OK

回帰パラメータファイルの指定(自動設定)

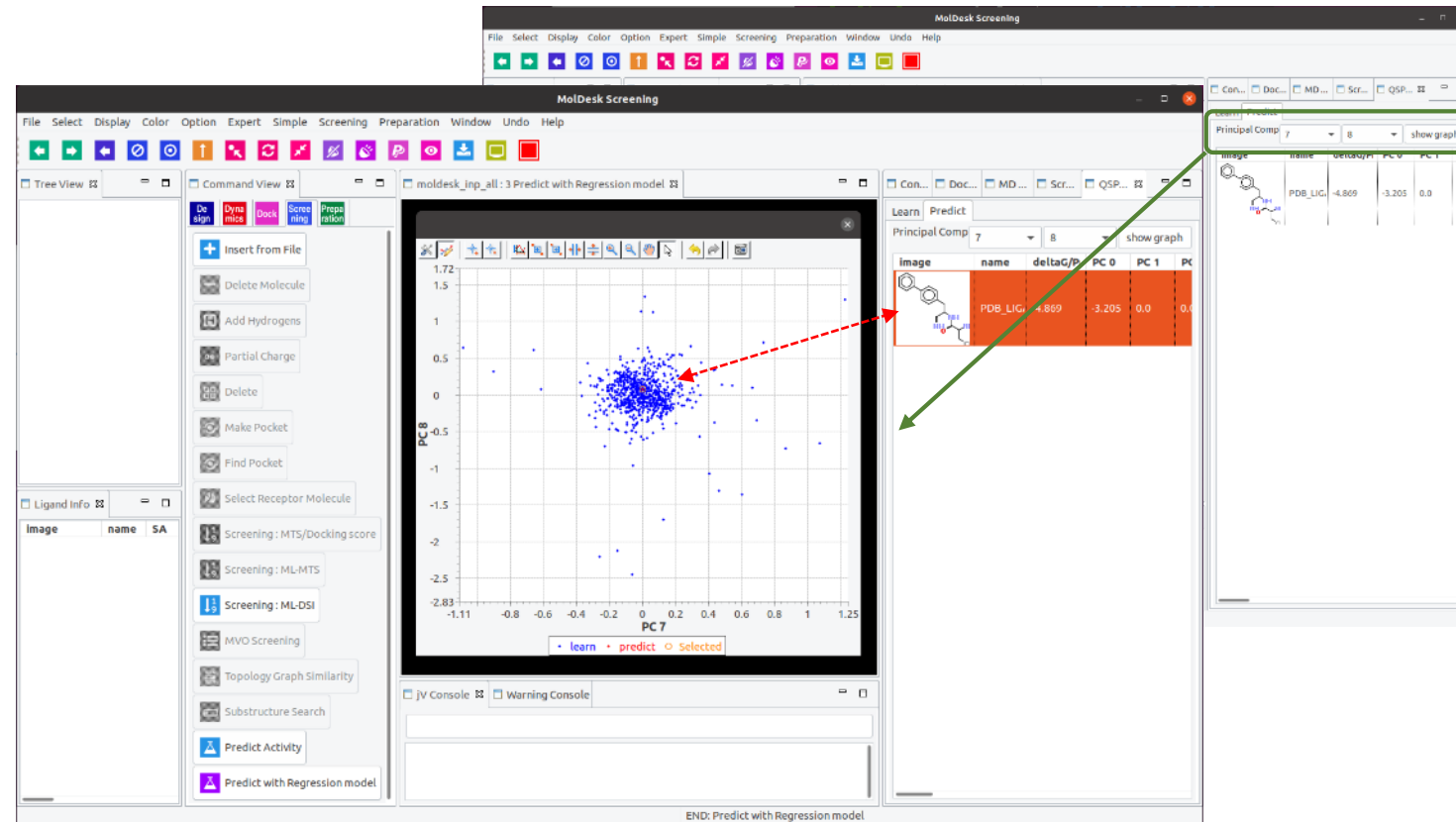
① 標的3D化合物ファイルの指定

④ 物性予測法による物性値推算

Predict with Regression model

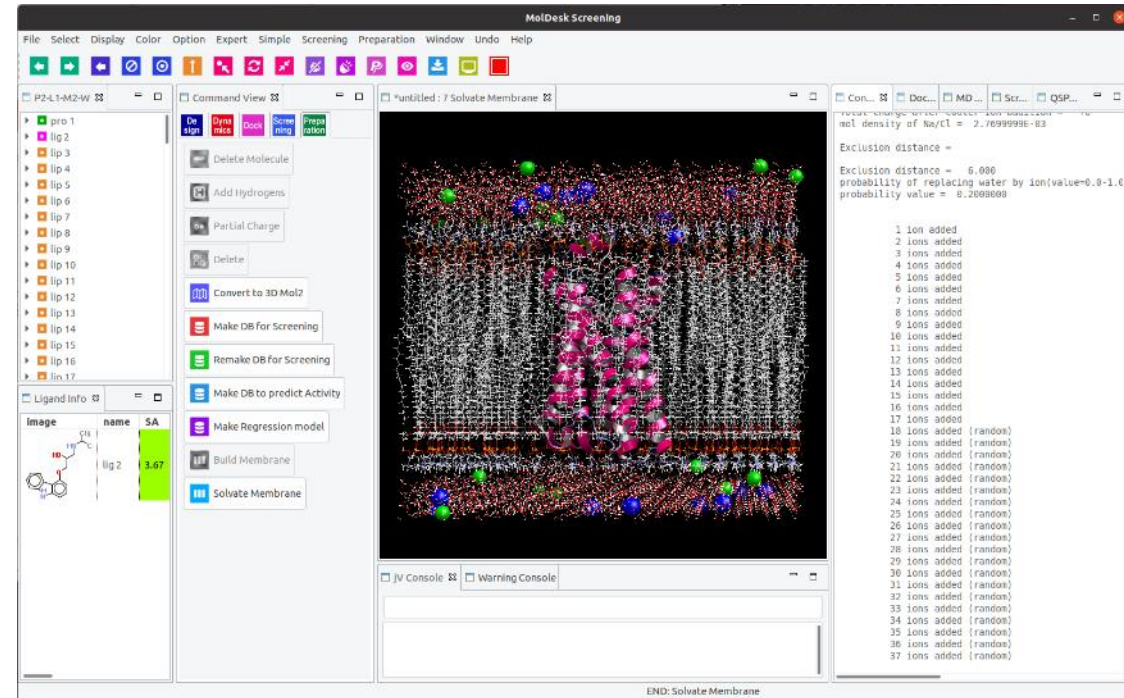
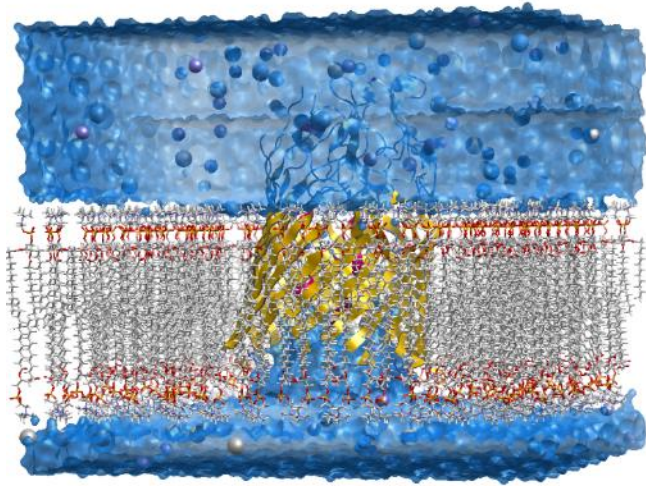
- 回帰パラメータの指定(自動設定)、標的3D化合物ファイルの指定—①
- OKボタンで物性予測法による物性値推算—④

物性予測法：推算の実例②



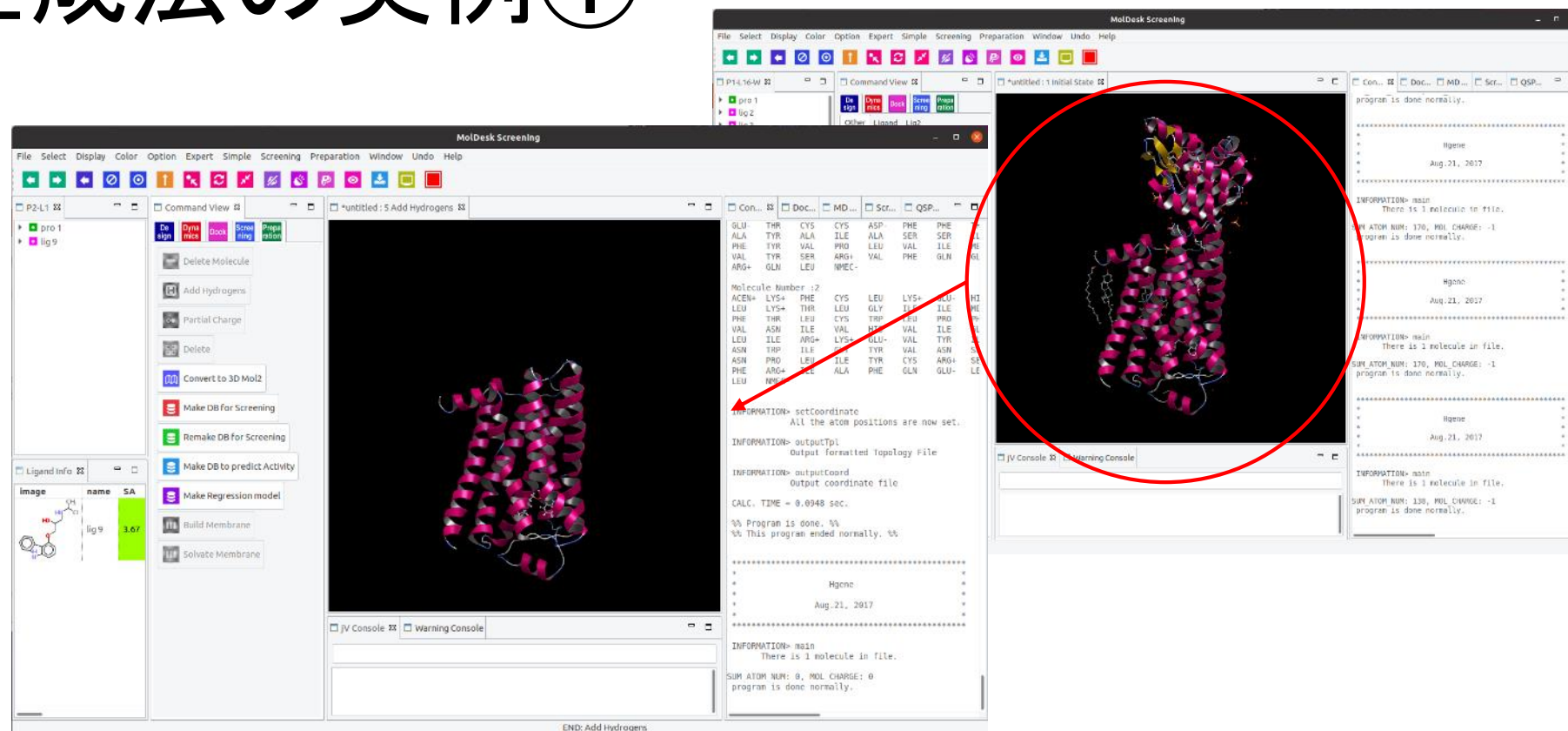
- 推算結果リストからPC軸を指定して、散布図を作成
- 散布図内での推算した標的化合物の位置を確認できる (Applicability Domainの確認)

膜系生成法 (myPresto/membgene)



- myPresto/membgeneによる膜系作成
- 全操作のエネルギー総和を最小化しながら、標的構造を脂質二重膜に挿入
- 低分子から蛋白質まで、同一の手法で脂質二重膜に挿入可能
- DLPC, DMPC, DOPC, DPPC, POPC, PEPCの6種類の混成系を作成可能
- MD計算用にはAmber Lipid14力場を割り当て

膜系生成法の実例①



- PDBより取得した蛋白質2RH1について(S)-Carazololのみ残したものを用意 (water、Lysozymeおよび(S)-Carazolol以外の化合物を削除)
- 事前に蛋白質に対してACE・NMEによるCAP処理の後、系全体に水素付加

膜系生成法の実例②

The screenshot displays the MolDesk Screening interface. On the left, the 'Command View' panel shows a list of commands, with 'Build Membrane' highlighted. In the center, a 3D model of a protein is shown, flanked by two orange rectangular boxes labeled 'x 2', indicating the width of the lipid bilayer. On the right, the 'Build Membrane' dialog box is open, showing the 'Composition ratio of lipid molecules in lipid bilayer' section. The 'DLPC' value is set to 0.000, and the 'Number of lipid layers around protein' is set to 2. The 'Force Field of lipid' is set to 'AMBER Lipid14'. The 'OK' button is highlighted. Below the dialog box, the 'JV Console' and 'Warning Console' panels are visible.

脂質分子種の混成割合

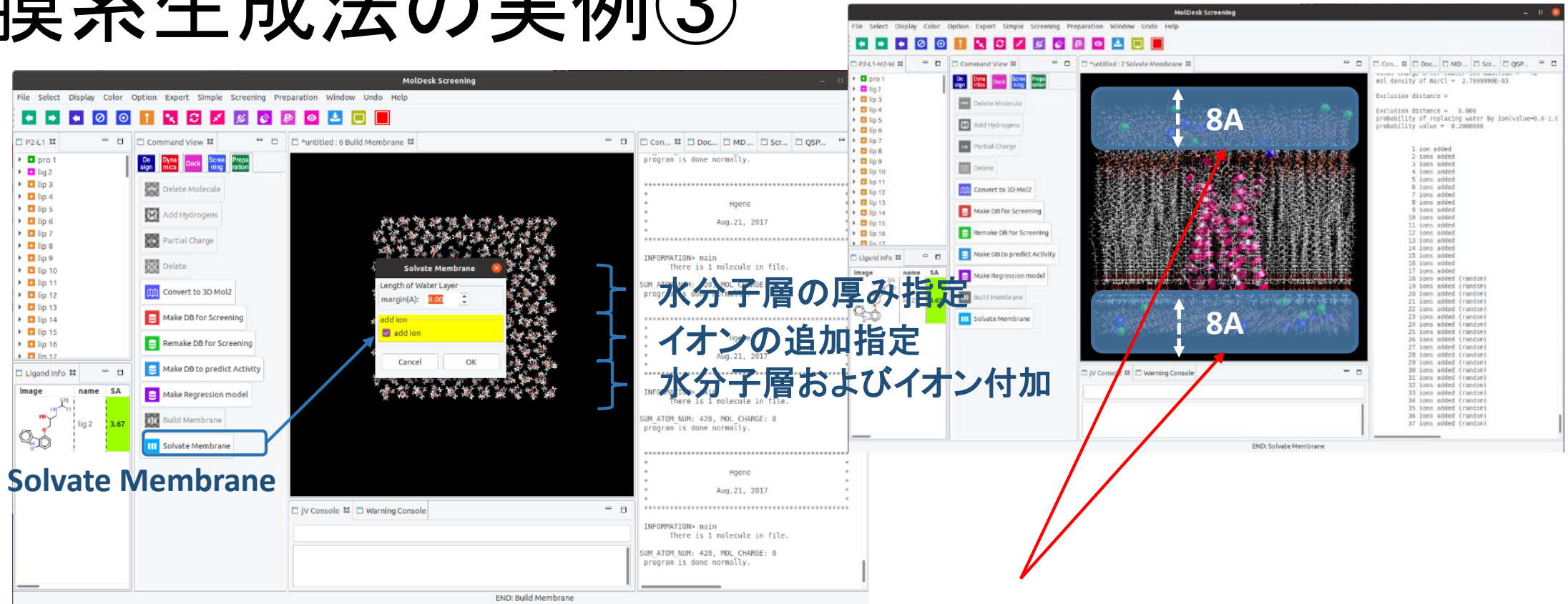
配置する脂質膜の最小幅

脂質二重膜の配置

Build Membrane

- 配置する脂質膜の**最小幅**、脂質分子種の混成割合を指定
- OKボタンで脂質二重膜を配置

膜系生成法の実例③



- 脂質二重膜の上下に配置する水分子層の厚み、イオン追加の設定
- OKボタンで脂質二重膜の上下に水分子およびNa⁺, Cl⁻イオンの層を配置

内容ー myPrestoを簡単に利用できるー

1. MolDesk(有償)のご紹介

① MolDeskの概要

② MolDeskの機能例(物性予測・膜系生成)

2. DataCheckサービス(無償)のご紹介

3. まとめ

4. 謝辞

DataCheckサービス（無償公開）

- 各種物性の推算、分子構造の比較などによってデータのチェックを行う簡易なweb計算サービス

※ 計算化学の非専門家が簡便に利用する事を想定

- サービス・サーバにアップロードされるデータに対し、物性推算、ドッキング・シミュレーション、バーチャル・スクリーニングなどmyPrestoツールを適用

サービス画面構成

- <http://www.mypresto5.com/web/cgi-bin/input.cgi> にアクセス

Input Form			
Target	Input Type	Input Area	Action
Compound	☒ SMILES	CC1(C(N2C(S1)C(C2=O)I)	1 Check
	☐ SDF/Mol2		2 Property Prediction 3 Similarity Search
Protein	☒ PDB	Drag and Drop a PDB file.	4 Check
	☐ PDB		6 Virtual Screening@4,5
Active Site	☒ Site residue ID list	(e.g. A42,A146,A147)	5 None
	☐ PDB		

Property Prediction status: Complete			
Target	Action	Status	Result file
C	Prediction	OK	property_prediction.csv

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

IMS BIO, July, 2020

入力パネル:
データ入力および操作

出力パネル:
計算状況およびデータ出力

入力パネル①

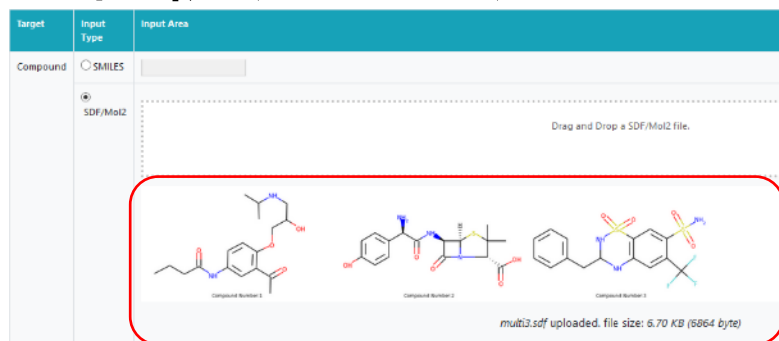
- “Target” に対して “Action” を実行できる
 - 例: Compound ⇒ Property Prediction

Input Form			
Target	Input Type	Input Area	Action
Compound	☒ SMILES	CC1(C(N2C(S1)C(C2=O)I	1 Check 2 Property Prediction 3 Similarity Search
	☐ SDF/Mol2		

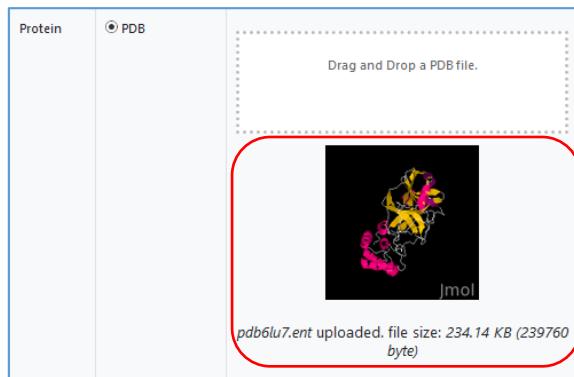
- “Input Type”でデータ形式を選択(例: SMILES)
⇒ “Input Area”でテキスト入力またはドラッグ & ドロップ(例: text-box)
⇒ “Action”で操作ボタンをクリック(例: Property Prediction)

入力パネル②

- 化合物(2D-SDF)のアップロード時には2D分子構造画像を表示



- 蛋白質(PDB)のアップロード時には3D分子構造画像を表示



画像をクリック
⇒ JSmol画面を別ウィンドウに表示

出力パネル

- タイトルおよび“status”欄に進捗/結果を表示（例：“Complete”，“OK”）

Property Prediction status: Complete			
Target	Action	Status	Result file
C	Prediction	OK	property_prediction.csv
C(ompound), P(rotein), A(ctive)			

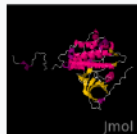


- “status”欄には計算途中にプログレスバー、計算後はOK/NGを表示
- 計算結果またはエラーログは“Result file”欄からダウンロード
 - 例：property_prediction.csv（物性予測結果ファイル）
- エラー時は“Result file”欄にmyPrestoツールのエラーログをリンク

ドッキング計算の実例①

- 1) 化合物としてDacomitinibのSMILESを入力
- 2) 蛋白質としてpdb1m17.entをアップロード
- 3) ポケット指定プローブPDB (Elrotinibの座標) をアップロード
- 4) [7 Docking Simulation@1,4,5] ボタンをクリック

⇒ ドッキング計算に必要な計算が開始される

Target	Input Type	Input Area	Action
Compound	☒ SMILES	c1NC(=O)C=C/CN1CCCCC1	1 Check 2 Property Prediction 3 Similarity Search
	☐ SDF/Mol2	Drag and Drop a PDB file.	
Protein	☒ PDB	Drag and Drop a PDB file.  pdb1m17.ent uploaded, file size: 245.29 KB (251181 byte)	4 Check 5 None 6 Virtual Screening@4.5 7 Docking Simulation@1.4.5
	☐ Site residue ID list		
Active Site	☐ Site residue ID list		5 None
	☒ PDB	Drag and Drop a PDB file. egfr_1m17_point.pdb uploaded, file size: 2.29 KB (2349 byte)	

IMSBIO, July, 2020

ドッキング計算の実例②

正常終了時には、以下のファイルがダウンロード可能となる

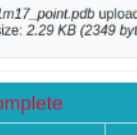
- 化合物チェックとして行った3次元化処理結果
[3dbuild.mol2](#)
- 蛋白質チェックの結果として実行ログおよび修正済みPDB
[pro.cor](#) (チェックログ), [pro.pdb](#) (修正済みPDB)
- ドッキング計算の結果としてランキングおよびドッキングポーズ
[docking.rnk](#) (ランキング), [docking_rank.mol2](#) (ポーズ)

※ 異常終了時には、エラーログが代わりにリンク表示される

Data checker

www.mypresto5.com/web/cgi-bin/input.cgi

Input Form

Target	Input Type	Input Area	Action
Compound	☒ SMILES	c1NC(=O)C=C/CN1CCCCC1	1. Check
	☐ SDF/Mol2		2. Property Prediction 3. Similarity Search
Protein	☒ PDB	Drag and Drop a PDB file.  pdb1m17.ent uploaded, file size: 245.29 KB (251181 byte)	4. Check 6. Virtual Screening@4.5
	☐ Site residue ID list	 (e.g. A42,A146,A147)	5. None
Active Site	☒ PDB	Drag and Drop a PDB file.  egfr_1m17_point.pdb uploaded, file size: 2.29 KB (2349 byte)	

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.rnk
C, P, A	Docking	OK	docking_rank.mol2

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

計算エンジン①： 構成

- DataCheck用エンジン(スクリプト)を用意
簡易的なmyPrestoツールの実行環境(**MDを除く**)
 - 3DBuild: 3次元化処理
 - Docking: ドッキング計算
 - Property: 物性予測(LogD, LogPa, LogS)
 - Receptor: 蛋白質準備(pdbcheck, tplgeneX, make_point, grid.file生成)
 - Screening: スクリーニング計算
 - Similarity: 類似化合物検索
 - Space: 化合物空間(ドッキング・スクリーニング・物性予測の結果をマージ)
- DataCheckサービスのバックエンドとして実行(オンラインバッチ処理)
- 現在処理時間を短縮する為、化合物ライブラリの規模を1,000分子に縮小 ⇒ ライブラリ全体に拡大するにはクラウド化が必要

計算エンジン②： 処理時間

- Workstation(Xeon)およびPC(Core i5)の3並列実行時間
- 1,000化合物程度の化合物ライブラリならば、5分以内に抑えられる

機能	Xeon E5-2697v2 2.7GHz, 3/48cores	Core i5-3470 3.2GHz, 3/4cores	対象
3DBuild	17.755/s	16.127/s	3化合物
Docking	6.173/s	6.284/s	3化合物
Property	2.210/s	1.871/s	3化合物
Receptor	23.759/s	22.451/s	1蛋白質
Screening	275.895/s 3138.428/s	263.193/s 2782.600/s	1,000化合物 8,223化合物
Similarity	68.596/s 564.362/s	67.980/s 557.592/s	1,000化合物(x 3化合物) 8,223化合物(x 3化合物)
Space	0.095/s	0.097/s	-

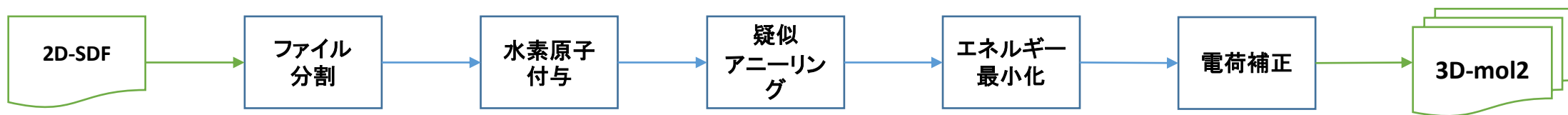
化合物ライブラリ①

- DataCheckで利用している**部分薬物分子ライブラリ**(1,000分子)は KEGG_MEDICUS (KEGG DRUG Database)より作成
- 入手先:
<ftp://ftp.genome.jp/pub/kegg/medicus/drug/>
- 利用許諾(**CC BY-SA 4.0**):
<https://dbarchive.biosciencedbc.jp/jp/kegg-medicus/lic.html>
- **2020/04/22入手、11,255レコード、KCFフォーマット**
(参考) 2020/09/08現在、11,319レコード
- KCF⇒SDF変換(8,506結合表データ) → 3D化处理 → 1000分子抽出

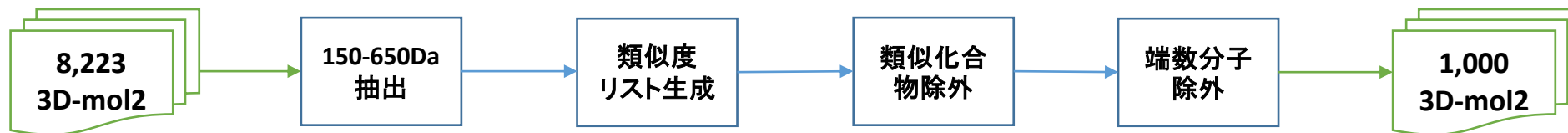


化合物ライブラリ②: 3D化+1,000分子抽出

- 3D化処理: 8,506 → 8,223レコード(未対応原子等により一部失敗)



- 1000分子抽出: 8,223 → 1,000レコード



- MW 150-650Daの範囲を抽出(8,223→7,210)
- MACCS-key + tanimoto-index で類似度リストを生成
- MWの値が近い類似度0.8125以上を除外(7,210 →1,120)
- 端数分をランダムに除外(1,120→1,000)
- これらの処理にmyPrestoのツール群を利用

内容ー myPrestoを簡単に利用できるー

1. MolDesk(有償)のご紹介
 - ① MolDeskの概要
 - ② MolDeskの機能例(物性予測・膜系生成)
2. DataCheckサービス(無償)のご紹介
3. まとめ
4. 謝辞

まとめ

- MolDesk (有償) および DataCheck サービス (無償) は、共に myPresto システムを簡便に利用できる環境をユーザに提供する
 - MolDesk では各機能 3 ステップ程度、DataCheck サービスでは全て 1 ステップで計算を開始可能 (逆に細かい制御は行えない)
- DataCheck サービスは、UI が簡便であってもバックエンドの処理はそれなり重く、化合物ライブラリを拡大するにはクラウド化が必要
 - 現在のサービスは、化合物ライブラリ (KEGG_MEDICUS) を 1,000 分子に縮小

謝辞

ご清聴ありがとうございました。

- myPrestoは、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」の支援を受けています。
- MolDesk、DataCheckサービスの開発にあたり、以下の皆様に感謝申し上げます。
 - 産業技術総合研究所 福西快文
 - 兵庫県立大学 神谷成敏、肥後順一、福田育夫
 - 大阪大学 川端猛、中村春木
 - JBIC 飯田慎二、榊原信雄
 - バイオモデリングリサーチ 中村寛則、BY-HEX LLP 若林吉徳、富士通 和田光人
 - 日立東日本ソリューションズ 黒澤隆、富士通九州システムズ 杉原裕介
 - 次世代天然物化学技術研究組合(参画企業、組合事務局)
 - 弊社 松下卓史、三十尾潔高、矢葺幸光