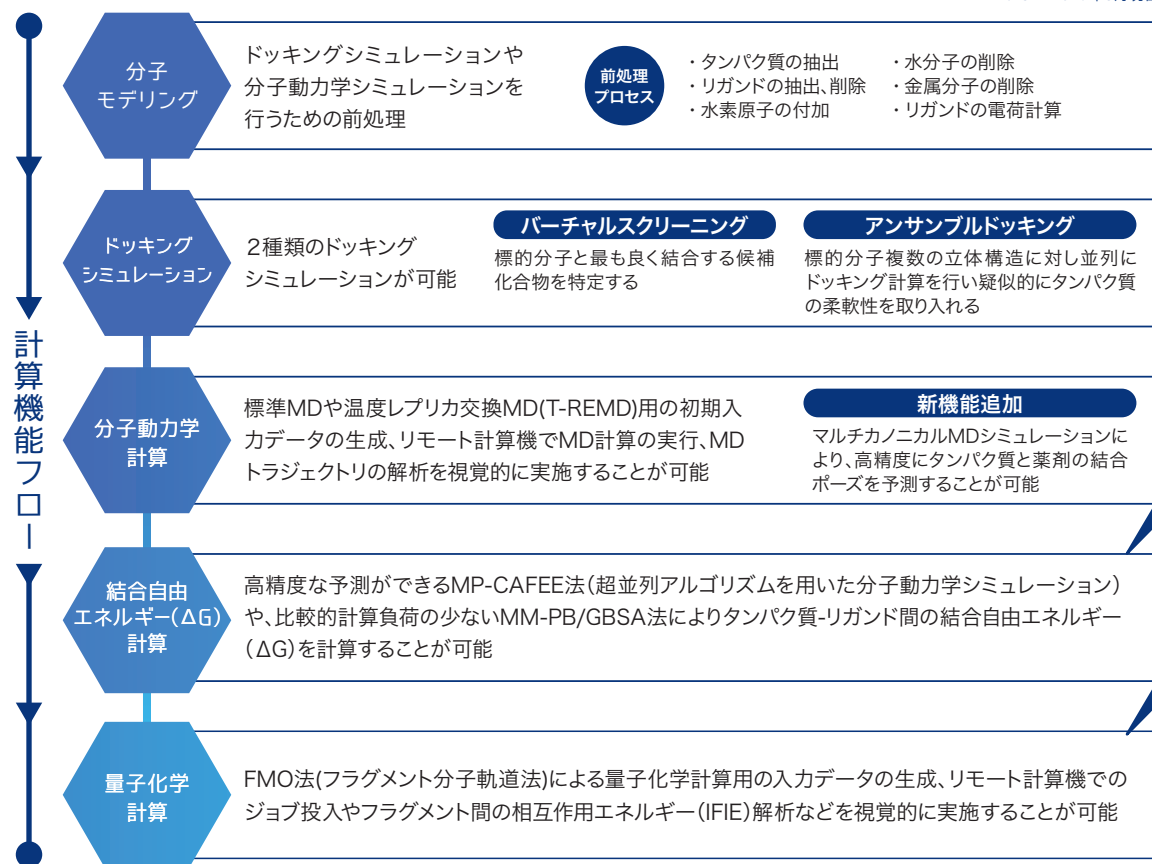


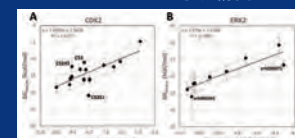
Kフォース 「K4」搭載機能* - “K4” Function -

*Ver3.2:2019年3月現在



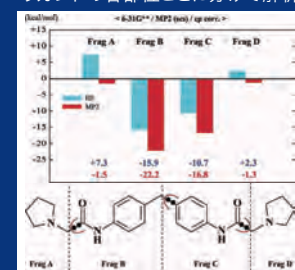
「K4」は、HPC(スパコン)と連携できる創業GUIシステムとしての強みを活かし、次世代の創業計算を容易に実施できます。創業のトレンドに合わせて、必要な計算機能を随時追加予定しております。

MP-CAFEE法による予測精度の向上



M. Araki et al. J. Chem. Inf. Model. 2016, 56, 2445-2456.

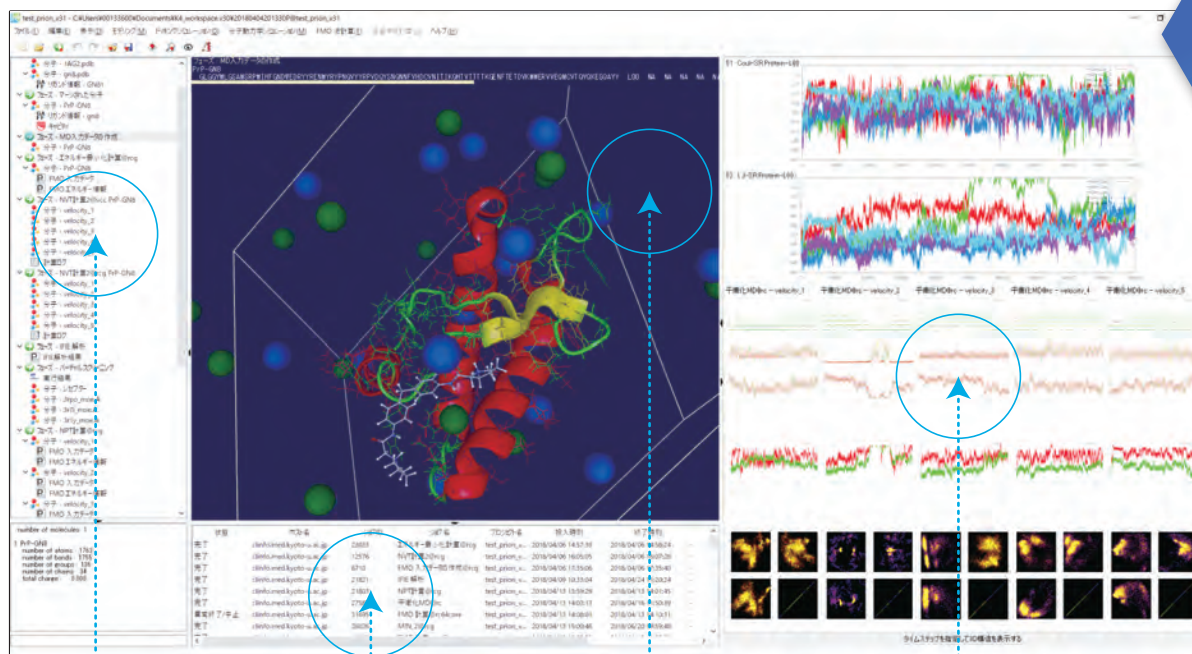
タンパク質とリガンドの相互作用を、リガンドの各部位ごとに分けて解析



T. Ishikawa et al. Chem. Phys. Lett. 2009, 474, 195-198.

グラフィカルユーザーインターフェース -Graphical User Interface(GUI)-

「K4」は、インシリコ創業の経験がない新薬開発者の方でもプロセスや計算状況がわかりやすく、感覚的に使用できるようインターフェースを工夫しています。また、複数の研究者が活用することを想定して、結果の共有や保存・読み出しがスムーズにできる設計です。



【ツリービュー】

現在のプロジェクトに含まれるすべてのデータをツリー形式で表示

各種HPCの計算進捗を一元管理

入力分子モデルや計算した分子モデルを視覚的に確認

分子動力学(MD)計算による、分子間相互作用エネルギーや静電相互作用エネルギーの推移、IFIE解析、 ΔG 計算の結果などを分かりやすく表示

【動作環境】「K4」実行環境: Windows 7 以上 対応HPC: 阪大PCクラス(VCC)・Focusスパコン他HPC

※サーバーをご利用の場合は別途設定が必要となります。 ※Windowsは、米国Microsoft Corporationの米国及びその他の国における登録商標です。

出張デモ等のお問い合わせ

現在、創業アプリケーション「K4」最新版の3ヶ月間無償試用を申込いただけます。また、「K4」デモをご希望の場合は、貴社へ出張して実施することも可能です。ご興味をお持ちの方は、右記連絡先までお問い合わせいただきますよう、お願い申し上げます。



公益財団法人 神戸医療産業都市推進機構
クラスター推進センター 連携・事業化推進グループ
〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町6丁目3番地5号神戸医療イノベーションセンター(KCMI)2階213

連絡先 E-mail: insilico@fbri.org

※「FBRI」のロゴは、公益財団法人神戸医療産業都市推進機構の商標です。 2019.02

製品情報及びサポート体制

■製品種別および価格一覧

(単位/円)

製品種別		K ⁴ ソフトウェアライセンス (年間)				オプション
		ライトパッケージ		フルパッケージ		出張サポート (1回あたり)
		シングルマシンライセンス	サイトライセンス	シングルマシンライセンス	サイトライセンス	
価格	企業・官公庁	375,000	1,875,000	1,250,000	6,250,000	110,000
	アカデミア	225,000	1,125,000	750,000	3,750,000	

【KBDD会員及び神戸医療産業都市進出企業・団体】

(単位/円)

製品種別		K ⁴ ソフトウェアライセンス (年間)				オプション
		ライトパッケージ		フルパッケージ		出張サポート (1回あたり)
		シングルマシンライセンス	サイトライセンス	シングルマシンライセンス	サイトライセンス	
価格	企業・官公庁	300,000	1,500,000	1,000,000	5,000,000	110,000
	アカデミア	180,000	900,000	600,000	3,000,000	

※価格は税抜価格となっています。

■機能一覧 (Ver4.0)

機能		ライトパッケージ	フルパッケージ
モデリング	ドッキングシミュレーションや分子動力学シミュレーションを行うための前処理：タンパク質抽出、リガンド抽出・削除、選択原子の削除、水分子の削除、金属原子削除、分子データのマージ、リガンドの電荷計算	○	○
	キャピティ作成	○	○
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	○	○
	アンサンブルドッキング	○	○
	MD入力データの作成	○	○
分子動力学シミュレーション	MD (非平衡MD、TREM除外)	○	○
	MD (非平衡MD、TREMを含む)		○
	McMD		○
	トラジェクトリ解析		○
	温度レプリカクラスタリング		○
	MMGB/PBSA計算		○
	MP-CAFE計算		○
	平衡MD計算結果のインポート		○
	FMO入力ファイル作成		○
FMO計算	FMO計算		○
	IFIE解析		○

※各種機能を実行するには、別途計算用サーバーが必要です。

■サポート体制

・受付

電話：03-5446-5532

FAX：03-5446-5550

e-mail：hpcs_support@hpc.co.jp 平

日9:30～17:30

※土曜・日曜・祝日 年末年始は休日となっています。

・サポート内容

【有償対応】

K⁴をインストールした計算機のシステム不具合・障害対応受付

翌営業日以降の出張オンサイト作業

※初期不良については無償で対応させていただきます。

■販売代理店（お問い合わせ先）

HPCシステムズ株式会社 西日本営業所

住所：〒600-8412 京都府京都市下京区烏丸通綾小路下る二帖半敷町646 ダイマルヤ四条烏丸ビル5F-B 電

話：075-353-0120

FAX：075-353-0121

e-mail：hpc_sales@hpc.co.jp