

ゲノム医療・創薬に貢献する創薬ビッグデータ統合システムの完成を目指してポスト「京」重点課題1で開発した超大規模生体分子システムシミュレーション、長時間分子シミュレーション技術を紹介します。

GENESIS

理化学研究所開拓研究本部 杉田理論分子研究室 杉田 有治

タンパク質、膜、核酸、糖鎖など、生体内分子系のための分子動力学ソフトウェア

A B C

generalized Replica-Exchange with Solute Tempering (gREST)

理化学研究所開拓研究本部 杉田理論分子研究室 杉田 有治

生体分子系の一部の温度を向上させることでサンプリング効率を向上させる

A C

generalized Replica-Exchange with Solute Tempering combined with a flat-bottom restraint

理化学研究所開拓研究本部 杉田理論分子研究室 杉田 有治

gREST法によってリガンドのサンプリングを加速し、リガンド結合ポーズを予測する

C

generalized Replica-Exchange with Solute Tempering combined with Replica-Exchange Umbrella Sampling (gREST/REUS)

理化学研究所開拓研究本部 杉田理論分子研究室 杉田 有治

gREST法とREUS法を組み合わせることでリガンド-タンパク質結合のサンプリング効率を向上させる

C

Gaussian accelerated Replica-Exchange Umbrella Sampling (GaREUS)

理化学研究所開拓研究本部 杉田理論分子研究室 杉田 有治

Gaussian accelerated Molecular Dynamics (GaMD)法とREUS法を組み合わせることで生体分子の構造サンプリングの効率を向上させる

C

Free Energy Perturbation (FEP)

理化学研究所開拓研究本部 杉田理論分子研究室 杉田 有治

標的タンパク質とリガンドの結合親和性を精密に計算する

B

ColDock

東京工業大学 生命理工学院 北尾 彰朗

タンパク質と低分子の複合体立体構造を全原子モデルで高速に予測する

A

dPaCS-MDMSM

東京工業大学 生命理工学院 北尾 彰朗

タンパク質複合体の解離シミュレーションによってタンパク質複合体の結合エネルギー・解離速度定数・結合速度定数を計算

A C

evERdock

東京工業大学 生命理工学院 北尾 彰朗

タンパク質-タンパク質ドッキングによって生成した大量のドコイから全原子モデルを使った高速計算で結合自由エネルギーを評価することによって尤もらしいものを選択する

C

SCUBA

量子科学技術研究開発機構 石田 恒

全原子モデル計算により核酸やタンパク質などの生体高分子を対象にした分子動力学シミュレーションを実行する

C

CafeMol

京都大学 大学院理学研究科 高田 彰二

生体分子の粗視化分子動力学シミュレーション

C

QM/MM RWFE-SCF 法

京都大学 大学院理学研究科 林 重彦

非経験的量子化学計算と長時間分子動力学シミュレーションを組み合わせた確率的最適化手法により、機能活性部位の電子状態と分子構造を精度よく決定する

A

Naive Bayes Classifier

東京大学 先端科学技術研究センター 山下 雄史

ペプチド・タンパク質の構造をナイーブベイジ分類器によって、構造変化を検知する

C

DirectionalStatistics

東京大学 先端科学技術研究センター 山下 雄史

ペプチド・タンパク質の2面角群に対して、周期性を考慮した平均・分散を算出する

C

WaterHall

東京大学 先端科学技術研究センター 山下 雄史

MDシミュレーションで得られる構造ファイル群に対して、計算位相幾何学的にタンパク質周囲の水分子分布を特徴付ける

A C

ゲノム医療・創薬に貢献する創薬ビッグデータ統合システムの完成を目指してポスト「京」重点課題1で開発した超大規模生体分子システムシミュレーション、長時間分子シミュレーション技術を紹介します。

MP-CAFEE (Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy with well-Equilibrated states)

東京大学 先端科学技術研究センター 藤谷 秀章

標的タンパク質と低分子量有機化合物の結合親和性(結合自由エネルギー)を大規模分子動力学シミュレーションによって精密に計算する

B

FUJI force field

東京大学 先端科学技術研究センター 藤谷 秀章

高精度タンパク質力場

A B C

TSMD (Tree Search Molecular Dynamics Simulation)

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 津田 宏治

タンパク質のフォールディングの過程を、高速にシミュレーションすることができる

C

BPBI (Binding pose prediction by best arm identification)

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 津田 宏治

MM-PBSAを用いた自由エネルギー計算の際、初期ドッキングポーズを機械学習で適切に選択することで、高速化する

A

ChemTS

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 津田 宏治

所望の特性を持つ化合物を、深層学習とシミュレーションを組み合わせ設計する

E G

COMBO (COMmon Bayesian Optimization)

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 津田 宏治

標的タンパク質とリガンドの結合親和性を精密に計算する

H

心毒性予測システム

東京大学大学院情報学環 寺田 透

薬剤が不整脈を誘発するリスクを予測するために心筋イオンチャネルに対する薬剤の親和性を予測する

D

Virtual Ligand (VL) method

京都大学大学院医学研究科 奥野 恭史

仮想リガンドによりタンパク質ポケット空間を膨張させた後、化合物ドッキング・MD/MM-PBSA法により医薬品化合物の結合ポーズを予測する

A

Parallel-rDock

京都大学大学院医学研究科 奥野 恭史

スパコンを用いてタンパク質-化合物ドッキング計算を高速に実行する

F

FP-rDock

京都大学大学院医学研究科 奥野 恭史

タンパク質柔軟性を考慮したタンパク質-化合物ドッキング計算を実行する

F

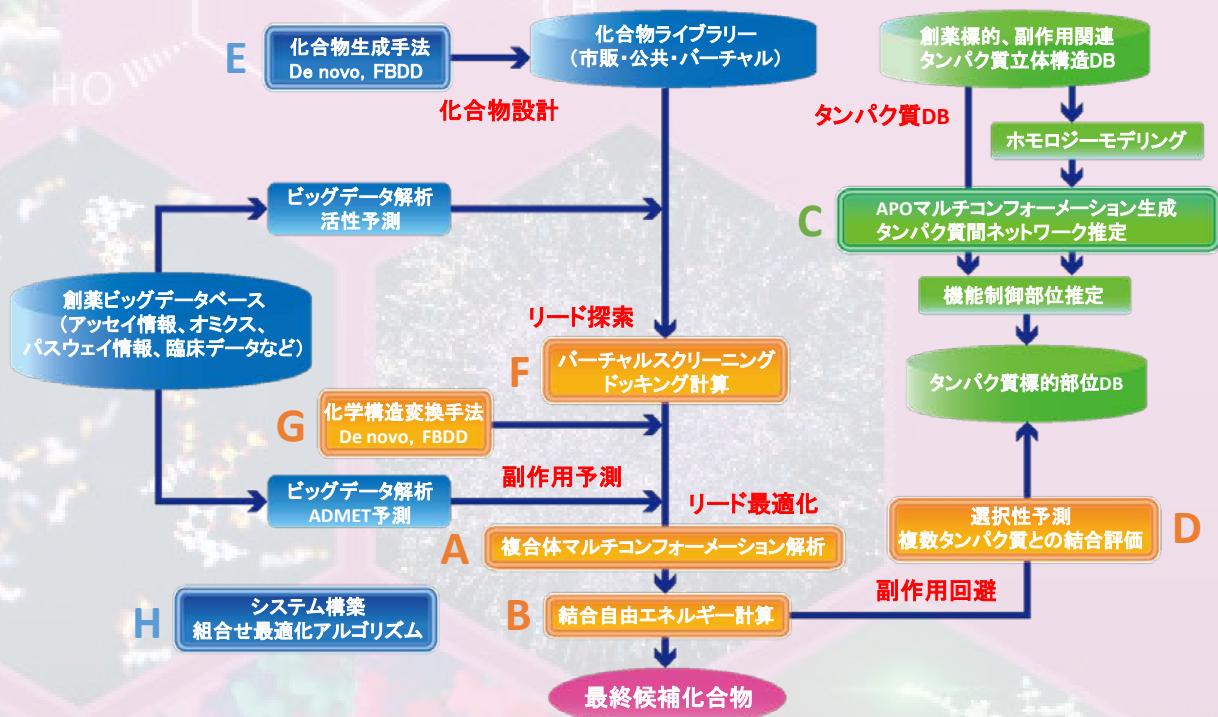
ポスト「京」重点課題1 研究成果紹介

未知の原野にそびえる叢智
その頂に創薬の未来を託して

ポスト「京」重点課題1
「生体分子システムの機能制御による
革新的創薬基盤の構築」

http://scidd.riken.jp/img/libraries/report_postk1.pdf

未知の原野にそびえる叢智
その頂に創薬の未来を託して



創薬ビッグデータ統合システム

http://scidd.riken.jp/research/research_software_library.html
のフローチャートから詳細をご覧ください。