

分子動力学シミュレーションによる 生体高分子の自由エネルギー解析

～創薬応用を目指して～

理学研究科 情報理学研究室

○准教授 おしま ひらく
尾嶋 拓

キーワード

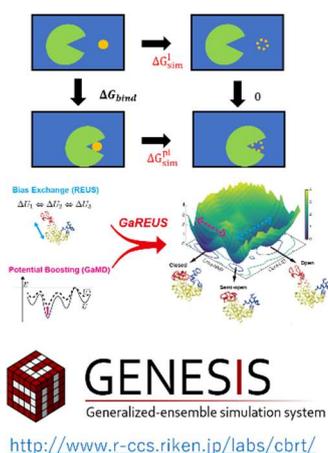
分子動力学シミュレーション、タンパク質、創薬、
バイオインフォマティクス



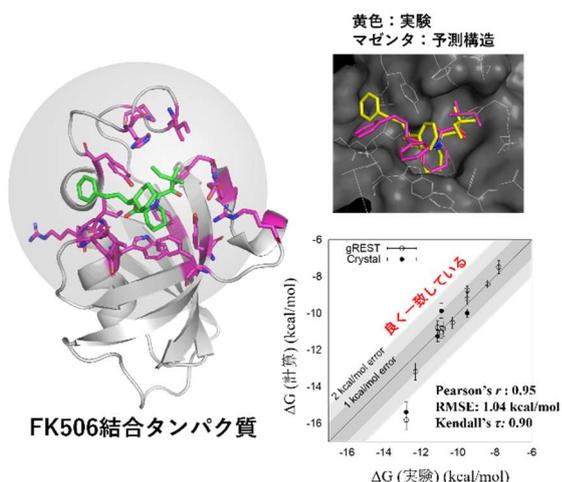
研究概要

私たちの研究室では、スーパーコンピュータなどの高性能計算機を用いて、主にタンパク質のシミュレーションを行っています。私たちが用いている分子動力学計算法では、すべての原子について運動方程式を逐次的に解くことで、実験で見ることができない分子の運動を正確に予測することができます。コンピュータ上で分子を「観測」することで、創薬において重要なタンパク質ーリガンド結合の分子メカニズムの解明と予測を行っています。分子動力学計算はスーパーコンピュータを用いても膨大な時間がかかるため、状態空間の一部しかサンプリングできず、予測精度が落ちてしまいます。そこで、効率的なサンプリングのための自由エネルギー計算法の開発を行っています。開発した方法論は分子動力学計算ソフト「GENESIS」に実装し、オープンソースとして公開しています。本発表では、自由エネルギー計算法および GENESIS について紹介し、リガンド結合問題への応用を紹介します。

シミュレーション手法の開発



タンパク質ーリガンド結合の予測



アピール ポイント

実験での観測が難しい分子どうしの相互作用を「観る」ことができる分子動力学シミュレーションは、分子メカニズムの解明だけでなく、新規薬剤開発や材料開発等の「ものづくり」において重要な示唆・情報を与えてくれます。自由エネルギー摂動法に関して、企業への高精度親和性予測に関する技術指導・共同研究の実績があります。計算データの解析のために機械学習・AI との融合を進めています。応用分野としては創薬や高分子材料開発などがあります。

