

2024/10/24



第7回HPCIコンソーシアムシンポジウム

FMO創薬コンソーシアムにおける HPCIの活用と産学官連携

大阪大学薬学研究科

Osaka University

福澤薫 Kaori Fukuzawa

HPCIを活用したFMO創薬プラットフォームの構築

産学官連携で日本発の実用的な高性能創薬技術を開発する

- ◆ 各種創薬ターゲットのテーマ
- ◆ 基盤構築WG
- ◆ FMO開発WG
- ◆ 構造生物WG
- ◆ 製剤WG
- ◆ シミュレーション連携WG

FMO創薬コンソーシアム

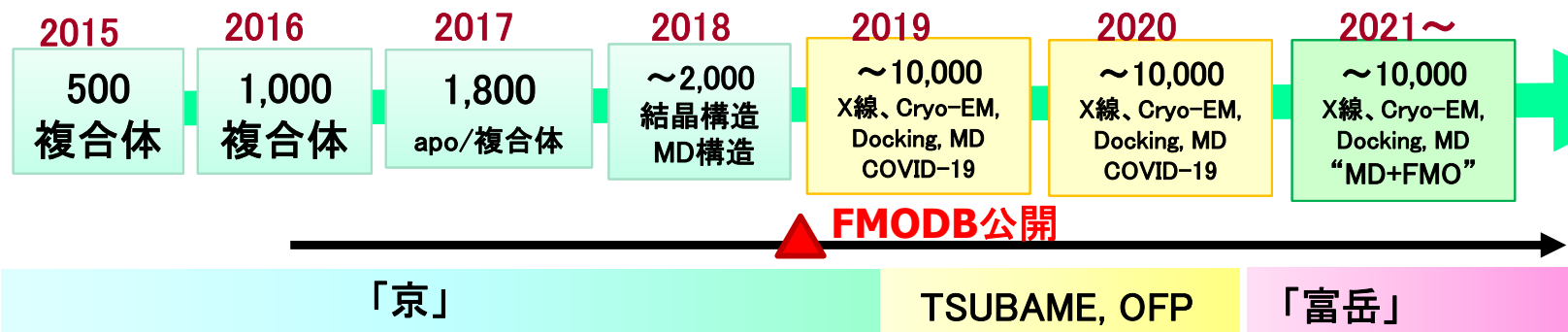


代表: 福澤 薫

スーパーコンピュータ



FMO計算を実施した構造数と利用したHPCI資源



+ SQUID

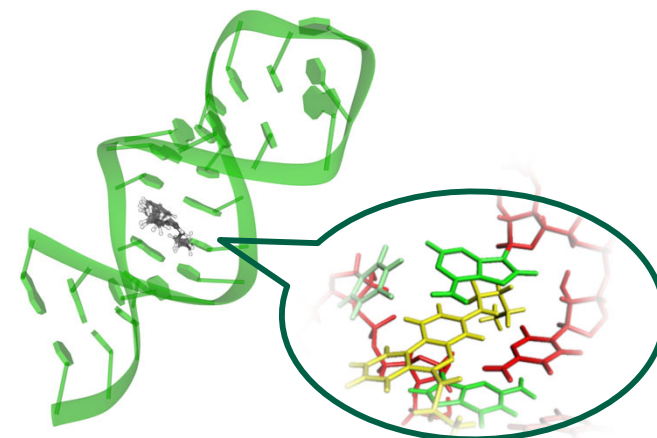
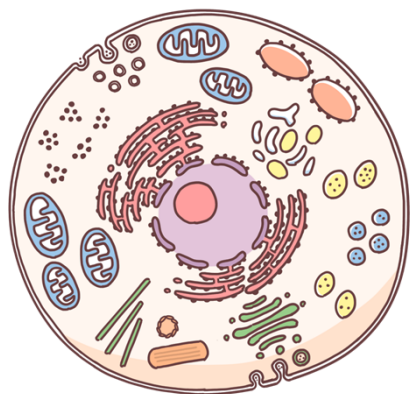
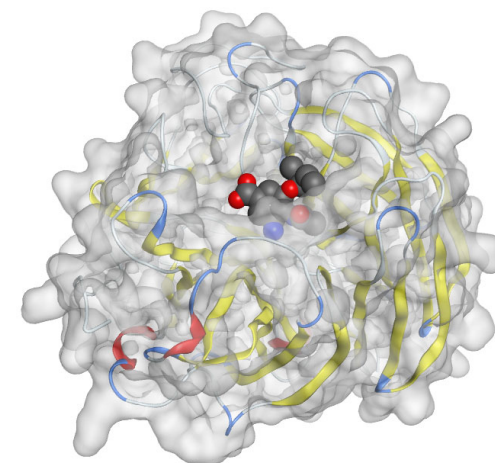
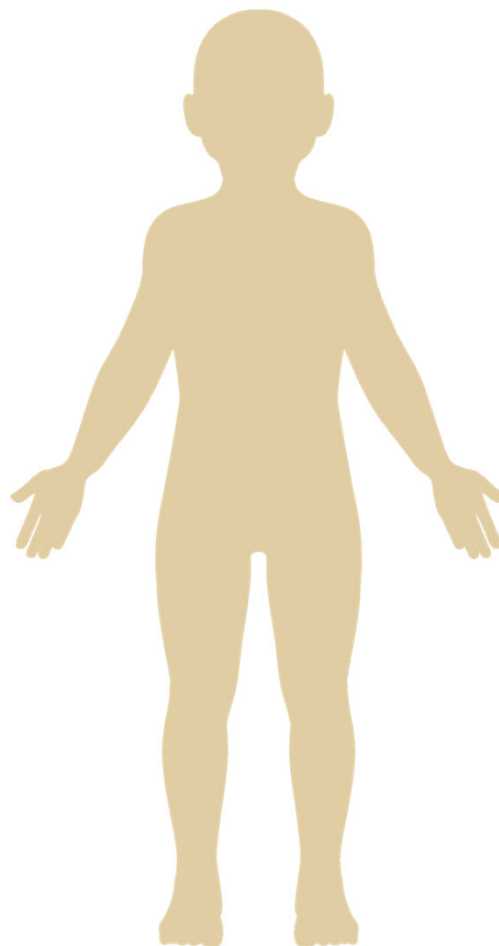
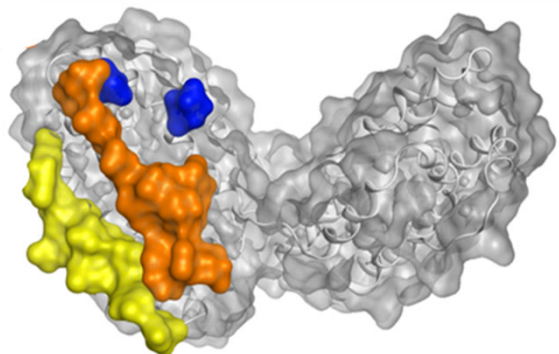
FMOデータベース



世界初のタンパク質量子
化学計算データベース

2024年5月時点で37,386の構造(PDBID 7,781個) のFMO計算結果を公開中

薬物はターゲット分子に作用する

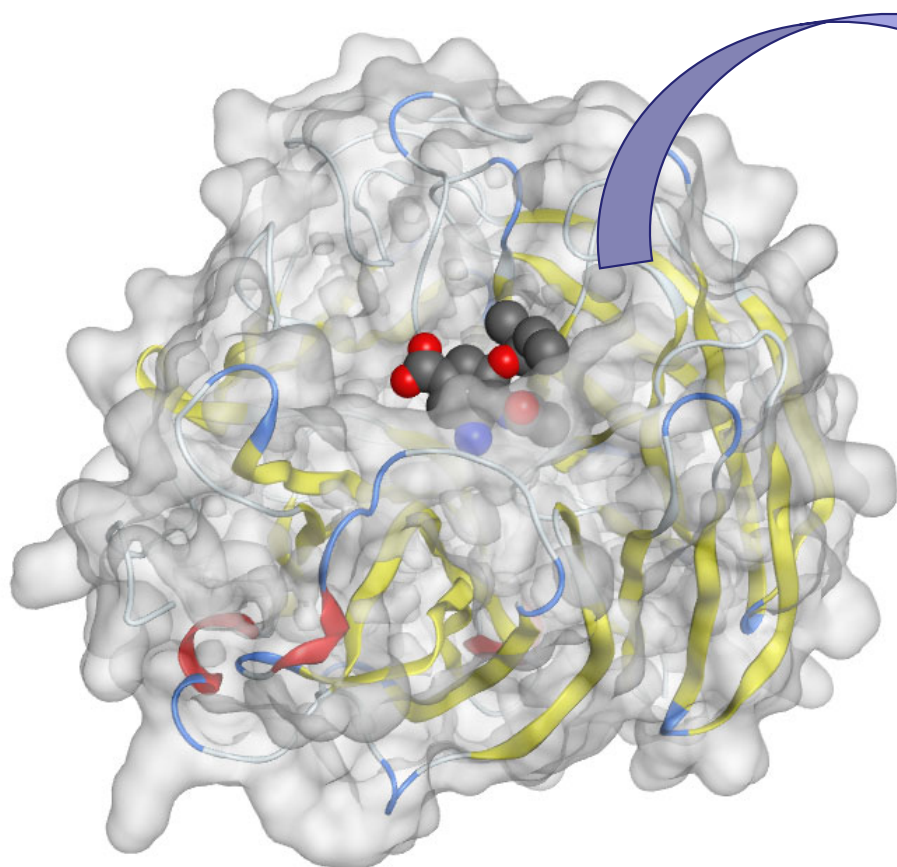


<https://science-illustr.com/cell/>

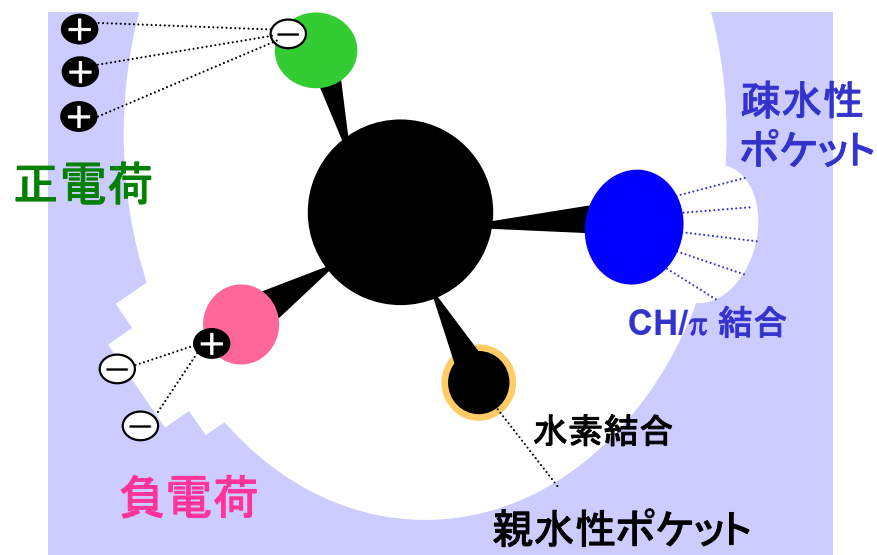
創薬の開発プロセス



構造ベース創薬: Structure-Based Drug Design (SBDD)



タンパク質と化合物の結合構造



分子間相互作用に基づく
ドラッグデザイン

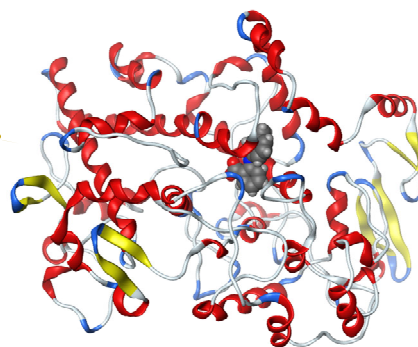
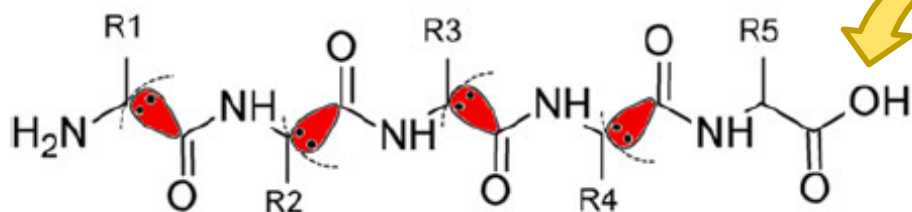
我々の目標: 量子化学計算による精密な分子設計

フラグメント分子軌道法(FMO法)

Kitaura et al, Chem. Phys. Lett.(1999).

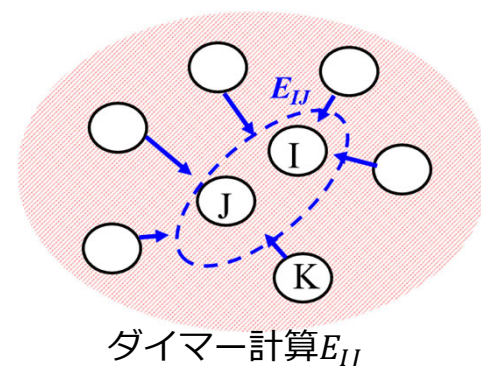
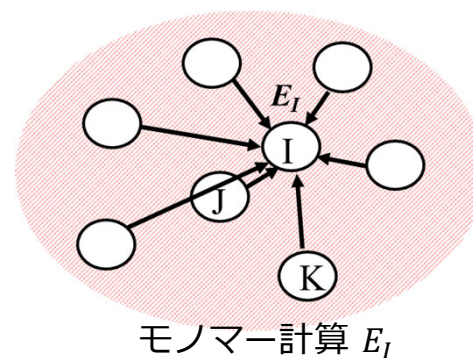
- 1999年に北浦和夫らにより提案された、**日本発の量子化学計算手法**。
- 巨大分子をフラグメントに分割し、部分エネルギーを集積することで、**タンパク質全体の高速量子化学計算**を実現。
- 相互作用解析に適している。

①巨大分子をフラグメントに分割



②全エネルギーの計算

$$E = \sum_{I>J} E_{IJ} - (N_f - 2) \sum_I E_I = \sum_I E'_I + \sum_{I>J} \Delta\tilde{E}_{IJ}$$



③フラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)の算出

④ エネルギー成分分割法(PIEDA)により、分子内・分子間の相互作用を定量的に解析

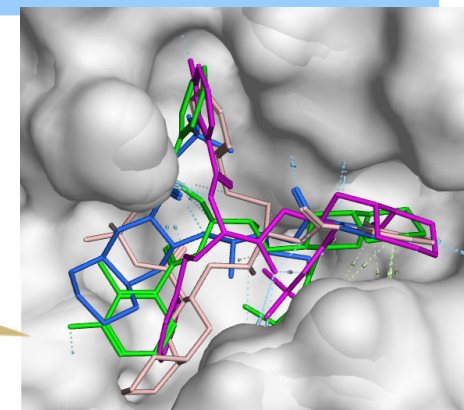
$$\Delta E_{IJ}^{\text{FMO}} = \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{ES}}}_{\text{IFIE(MP2) or PIE 静電相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{EX}}}_{\text{交換反発相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{CT+mix}}}_{\text{電荷移動相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{DI}}}_{\text{分散力相互作用}}$$

分子間相互作用とPIEDA成分の関係

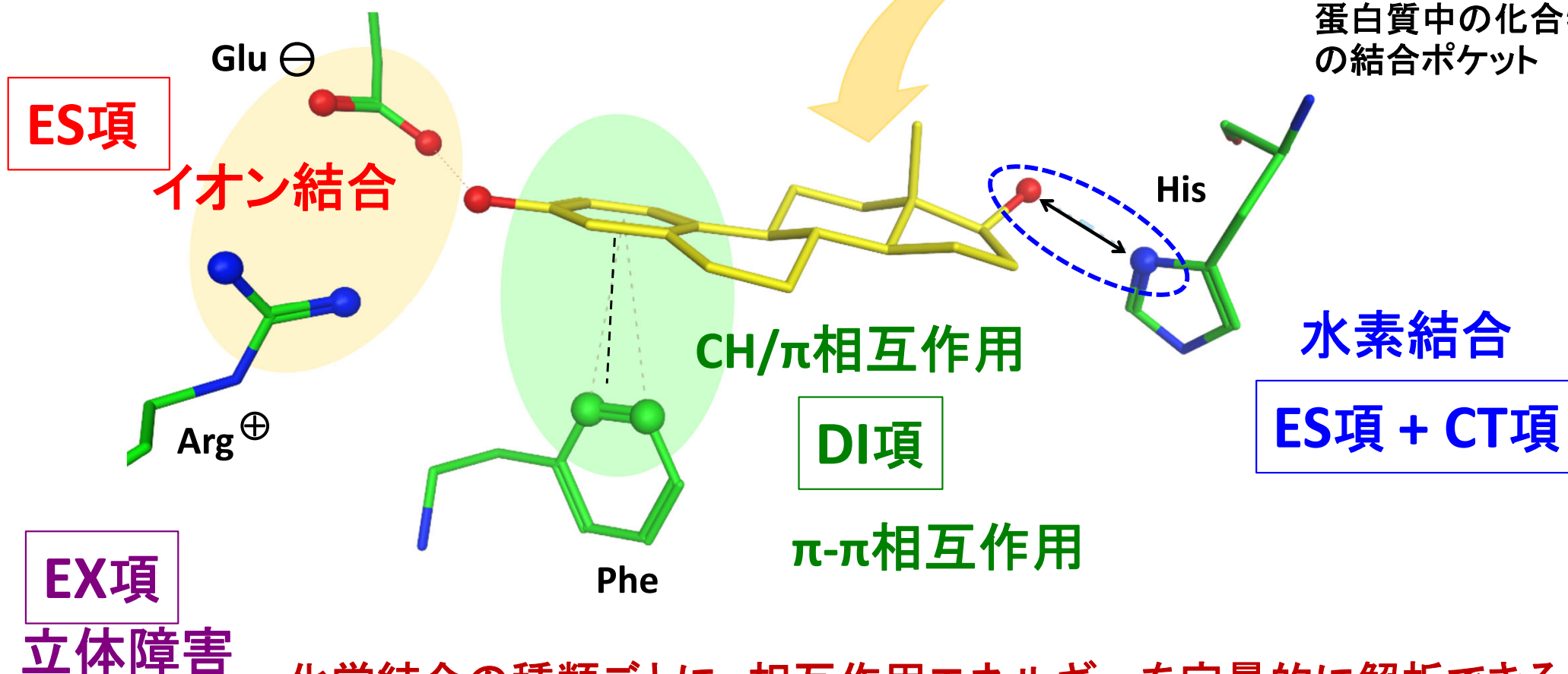
Fedorov and Kitaura, *J. Comput. Chem.* 28, 222 (2007).

$$\Delta E_{IJ}^{\text{FMO}} = \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{ES}}}_{\text{静電相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{EX}}}_{\text{交換反発相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{CT+mix}}}_{\text{電荷移動相互作用}} + \underbrace{\Delta E_{IJ}^{\text{DI}}}_{\text{分散力相互作用}}$$

IFIE(MP2)
or PIE



蛋白質中の化合物の結合ポケット



化学結合の種類ごとに、相互作用エネルギーを定量的に解析できる

FMO法の主な実装系・プログラム

- 産総研 Fedorov、北浦ら ⇒ GAMESS/FMO
- 鹿児島大 石川ら ⇒ PAICS
- 立教大 望月、国立衛研/RIST 中野ら ⇒ ABINIT-MP/BioStation

純国産プログラム

ABINIT-MP/BioStation: 無償で公開中

➤ ABINIT-MP: FMO計算専用エンジン

HPCI共用計算資源にプリインストール

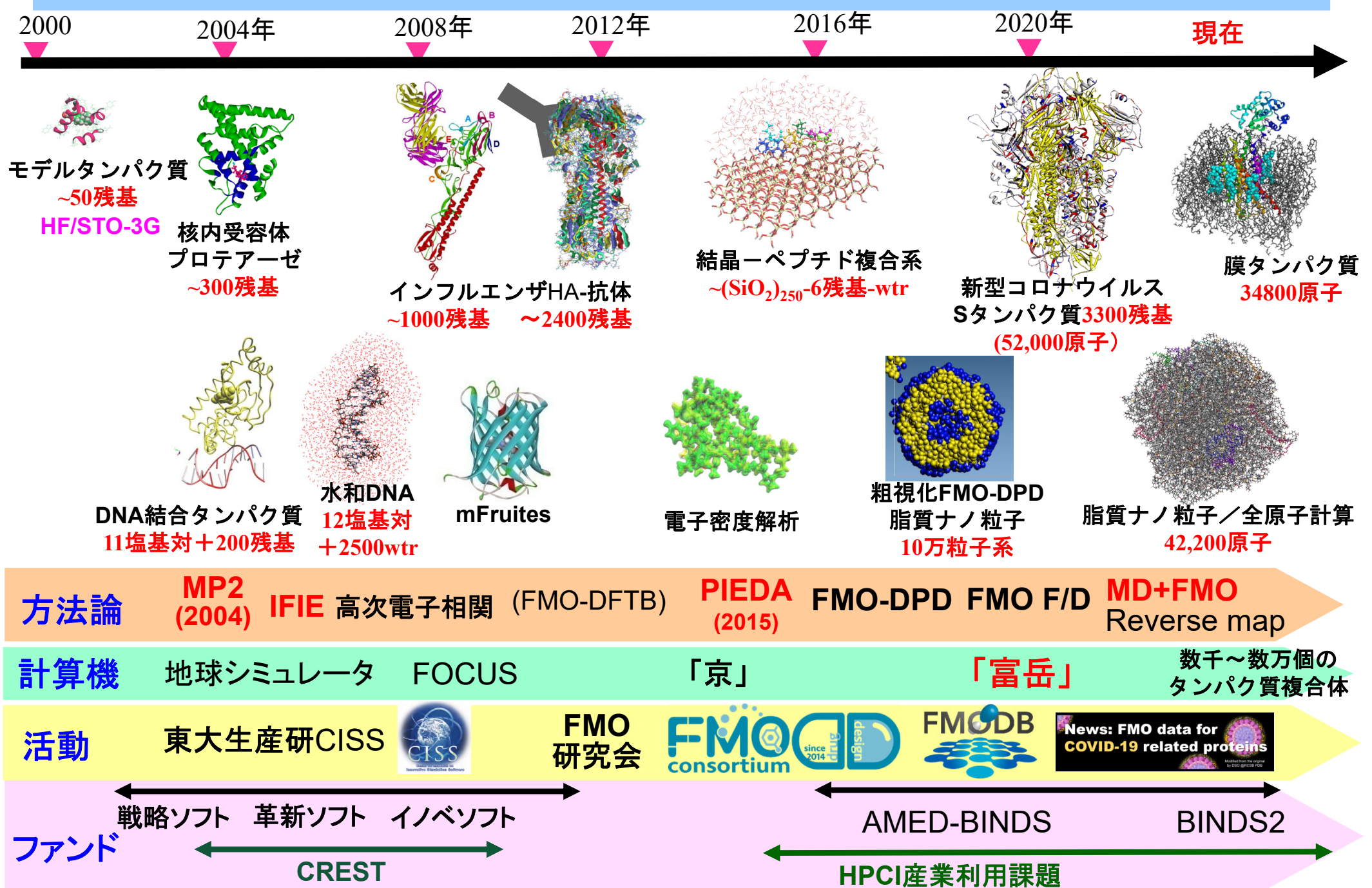
https://www.hpci-office.jp/for_users/appli_software/appli_abinit-mp

➤ BioStation Viewer: ABINIT-MP専用GUIプログラム(win版)

<https://fmodd.jp/biostatioviewer-dl/>



ABINIT-MPの開発と創薬応用系の発展



産学官連携で日本発の実用的な高性能創薬技術を開発する

◆ 第1期(2014-2016年度) 30数名

- ✓ 「京」利用開始。500構造/年を目標。4WG体制
- ✓ PDB & ChEMBLデータを用いた網羅的解析と事例創出。
- ✓ 自動計算プロトコル作成、FMO DB構想。



◆ 第2期(2017-2019年度)

- ✓ FMO DB公開(2019.2) HPCI 端境期
- ✓ 多様なタンパク質構造に対応。5WG体制。



◆ 第3期(2020-2022年度)

- ✓ 富岳利用開始。コロナ禍での活動。8WG体制
- ✓ COVID-19特集など網羅的なデータ収集
- ✓ 静的解析から動的解析へ大きな進化



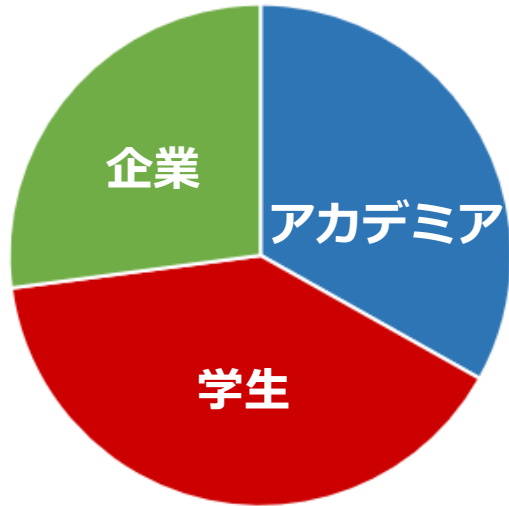
◆ 第4期(2023-2025年度)

- ✓ 構造生物学、合成、タンパク質工学などの実験研究との融合
- ✓ 多様な創薬モダリティ
- ✓ AIの活用



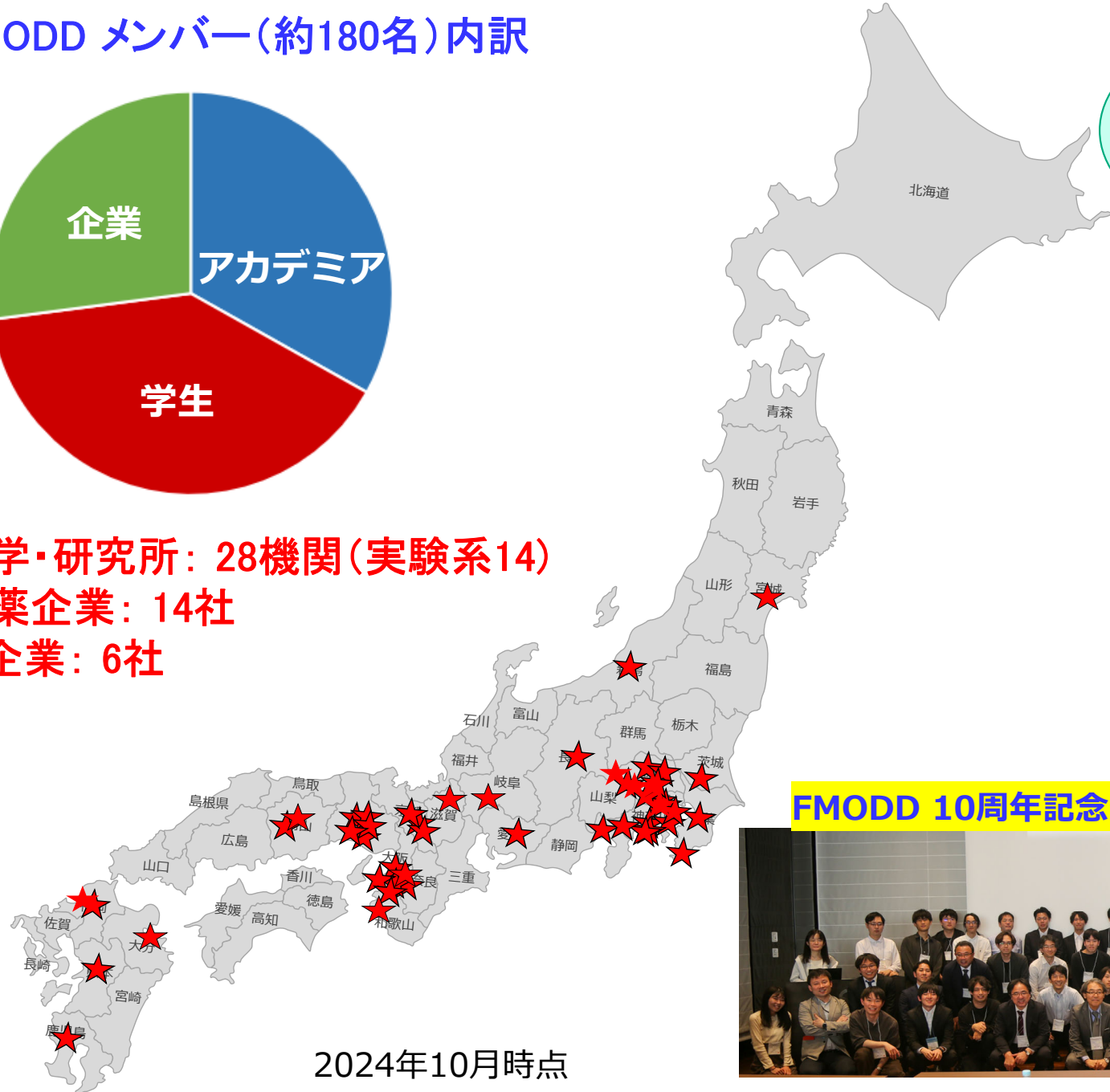
FMODDは、HPCI最大級のユーザーグループです

FMODD メンバー(約180名)内訳



大学・研究所: 28機関(実験系14)
製薬企業: 14社
IT企業: 6社

世界最高性能の量子化学計算をオールジャパンで実施中



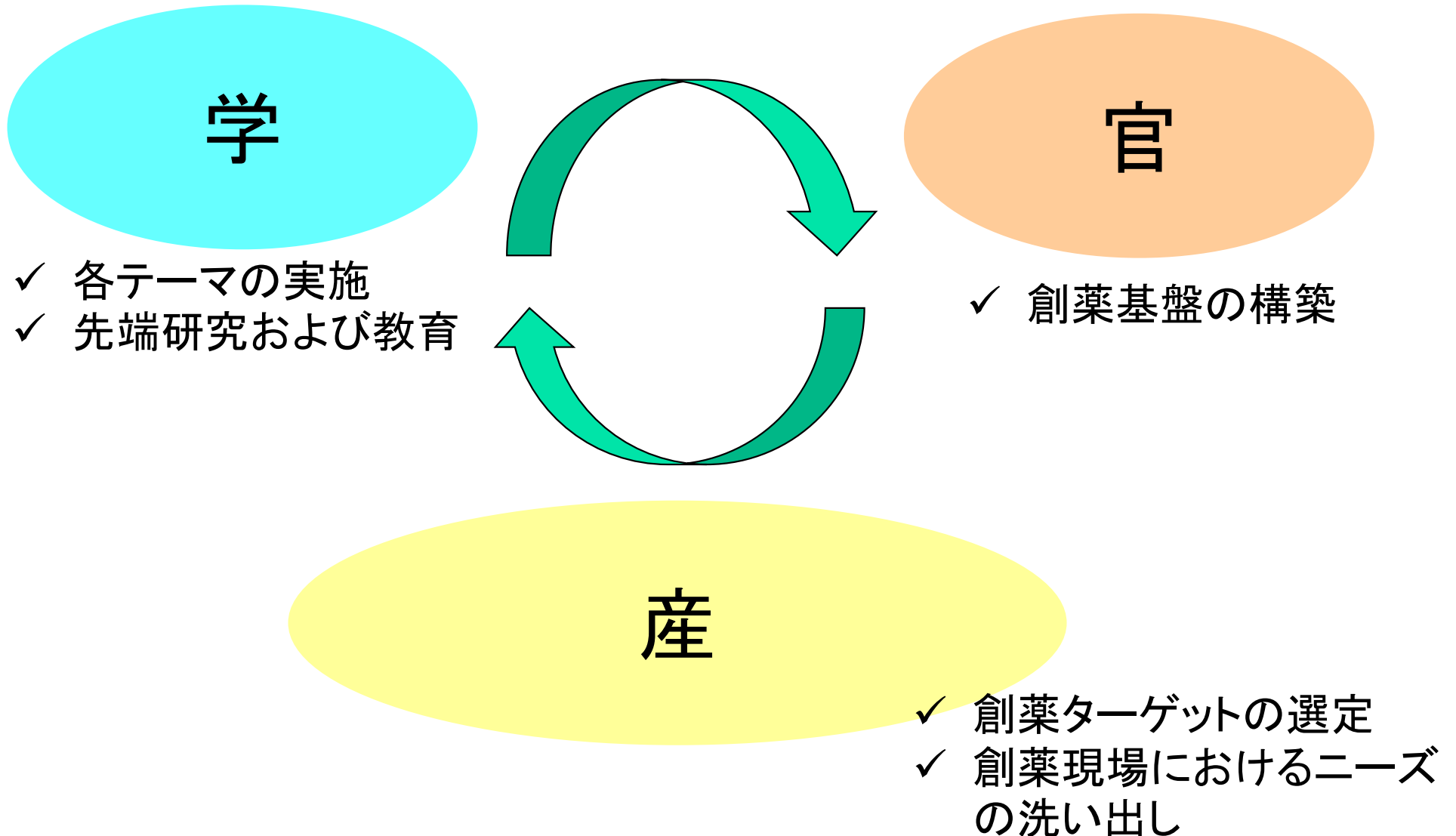
2024年10月時点

FMODD 10周年記念シンポジウム@中之島センター



FMODDにおける産学官連携

「成果公開」が基本

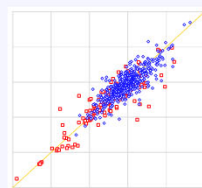


第3期：FMO創薬コンソーシアムと8つのWG

第4期：多様なターゲットに対する研究テーマを推進

タンパク質—リガンド結合、酵素反応、金属タンパク質、
タンパク質—タンパク質認識、ウイルスタンパク質、抗体、
RNA-低分子、環状ペプチド、RNA/DNA-タンパク質複合系、
膜タンパク質、ヒストン翻訳後修飾、光受容体タンパク質、転写因子

方法論開発

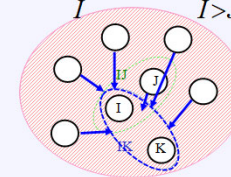


シミュレーション
連携WG



基盤構築WG

$$E_{\text{total}} = \sum_I E'_I + \sum_{I>J} \Delta \tilde{E}_{IJ}$$

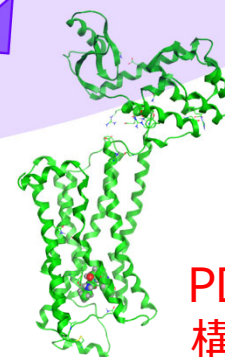


FMO開発WG

製剤WG



構造生物
WG



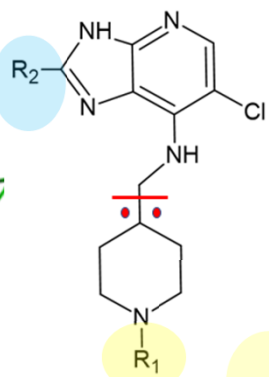
PDBjとの連携、
構造精密化など

ナノ粒子、固体分散体、
包接複合体、結晶多形
など

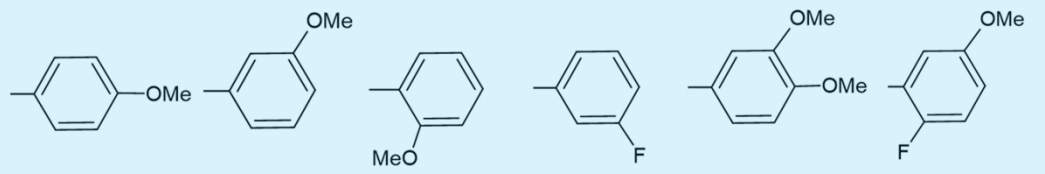
FMO創薬応用の典型例：構造活性相関と相互作用解析

ヤーヌス・キナーゼ(JAK1) 阻害剤の活性予測

平井、町田(星薬大)
7 9



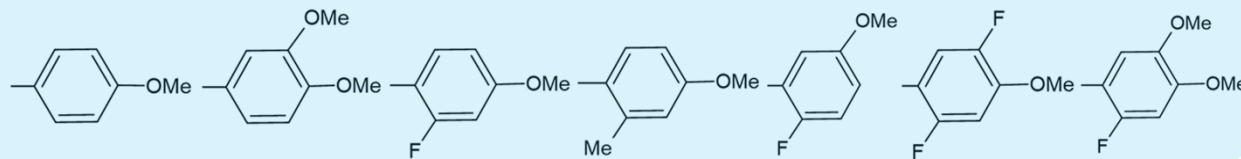
$R_1 = \text{CH}_3$, $R_2 =$



$IC_{50} (\mu\text{M})$ 0.317 0.274 12.2 0.832 0.073 0.275

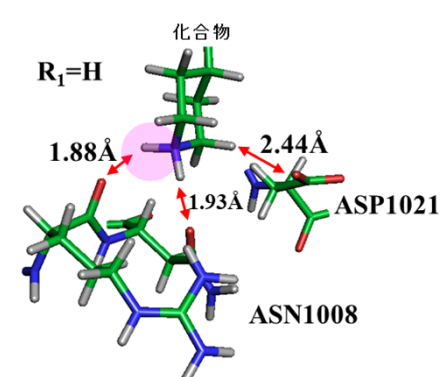
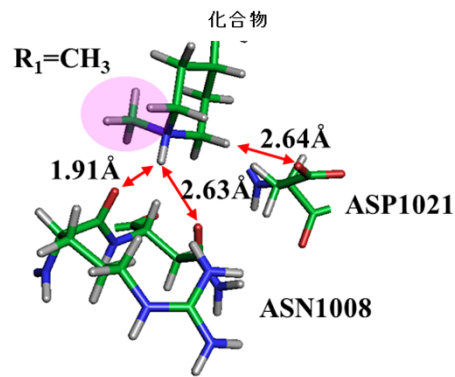
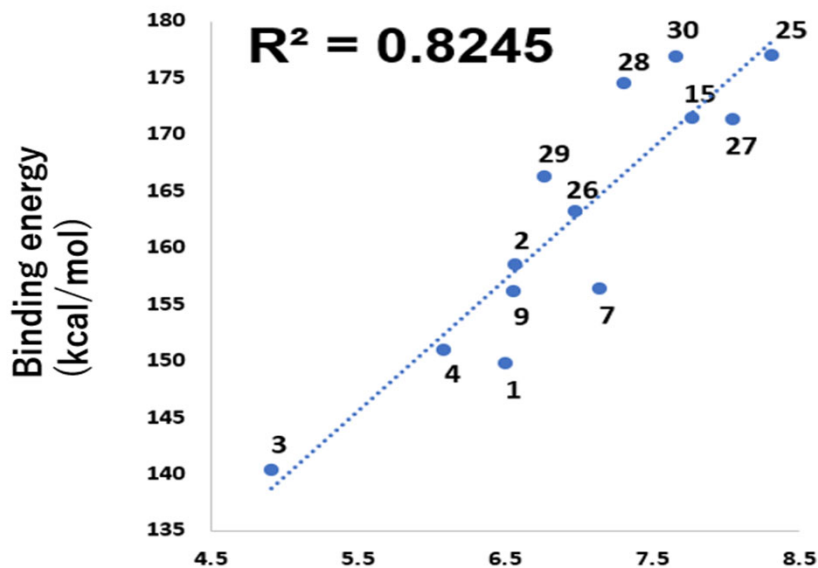
化合物 15 25 26 27 28 29 30

$R_1 = \text{H}$, $R_2 =$



$IC_{50} (\mu\text{M})$ 0.017 0.0049 0.106 0.009 0.049 0.173 0.022

JAK1と化合物30の複合体構造
(PDB ID:5E1E)

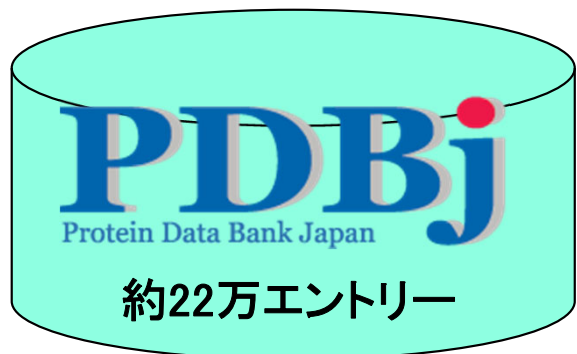


$$\Delta E_{\text{bind}} = \Delta E_{\text{int}} + \Delta E_{\text{lig}}^{\text{def}}$$

pIC_{50}

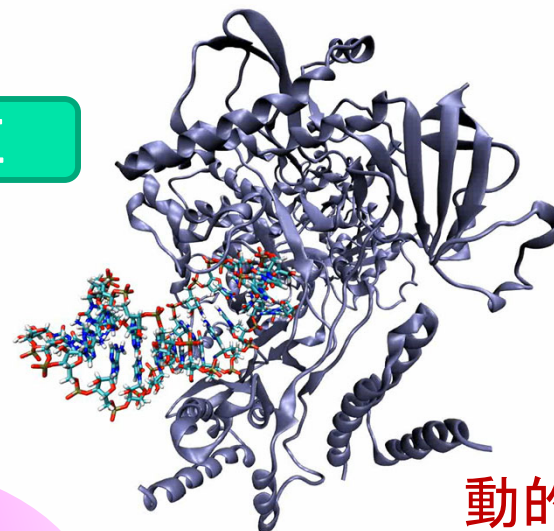
「富岳」時代のFMO創薬研究

古典MD計算からの構造サンプリングとFMO計算を組合わせた“MD+FMO”計算



静的構造

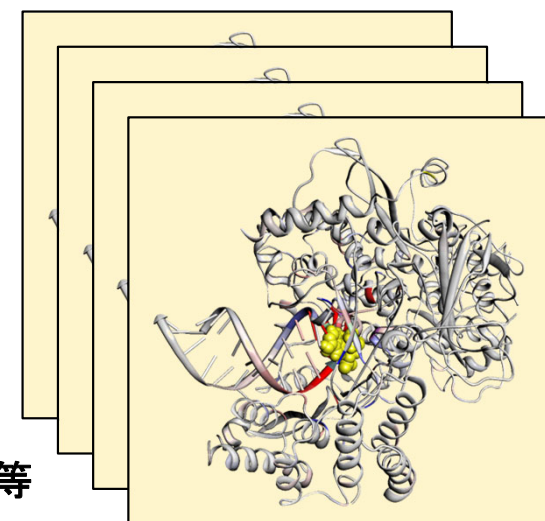
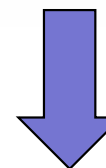
MD計算



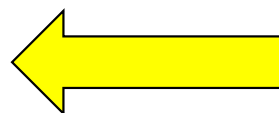
動的構造

MD+FMO計算解析

構造サンプリング

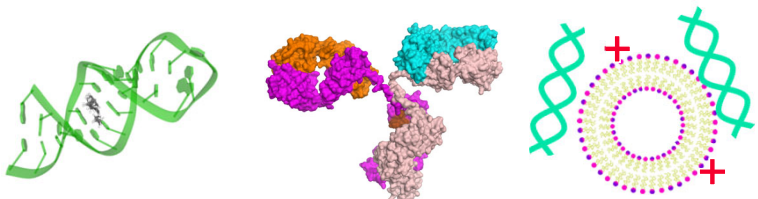


FMO計算



様々な創薬モダリティに対する予測的な計算・解析が可能に！！

- 統計的な解析
- ✓ 結合性予測
 - ✓ 相互作用エネルギー評価、等



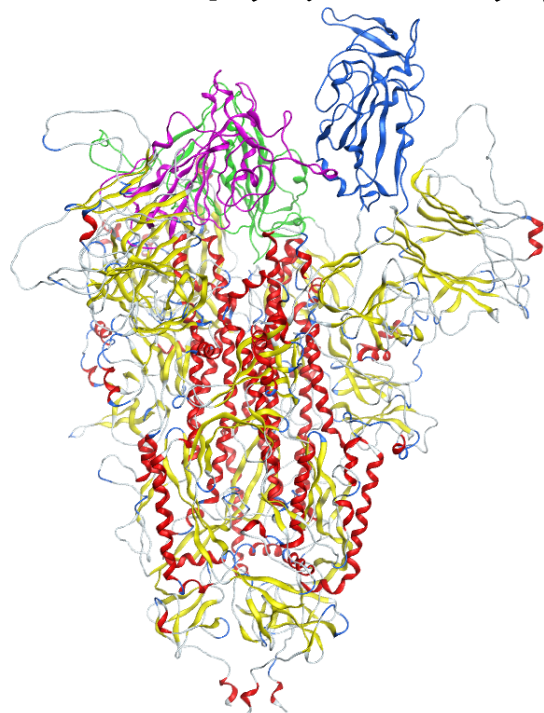
望月 (立教大), 田中 (神戸大), 福澤 (星薬大)ら

課題4: 新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算

Oakforest-PACS (hp200146)も連携



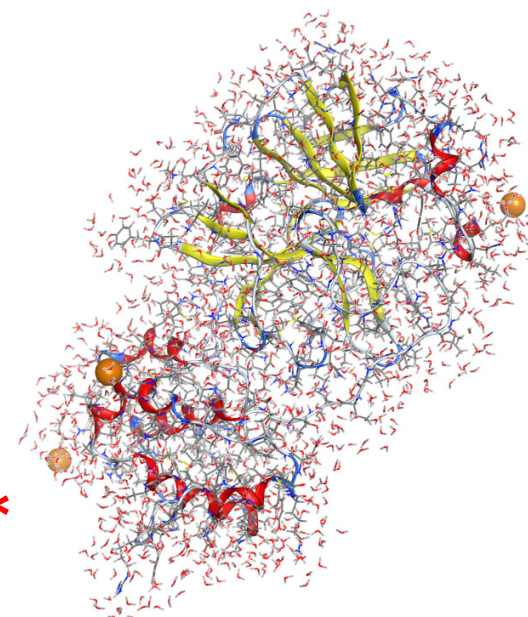
➤ スパイクタンパク質



3,300残基のMP3/cc-pVDZ
計算が8ラックで3.4時間

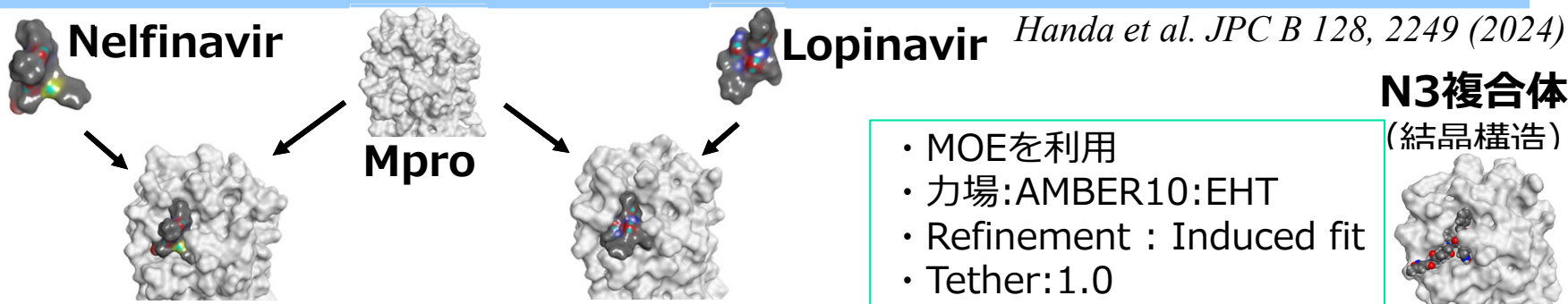
1,000構造のMP2/6-31G*
計算が半ラックで5時間

➤ メインプロテアーゼ



古典MD+FMOによる動的挙動解析: 計算の流れ

1. ドッキング



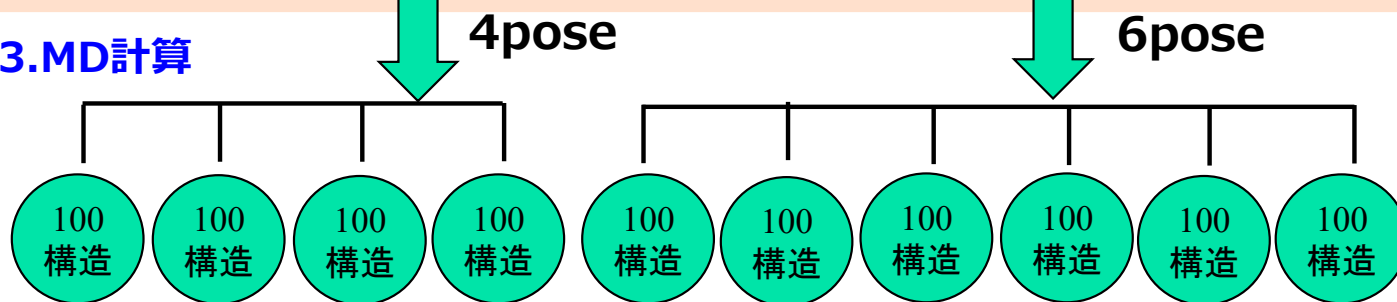
2. ドッキング構造に対する FMO計算

30pose 30pose

FMOエネルギーを用いたスコアリング

FMO-MP2/6-31G*
一点計算

3. MD計算



- 力場 : Amber10:EHT
- 溶媒 : 水
- 周期境界条件
- 昇温 : 50ps(0-300K)
- 平衡化 : 50ps(300K)
- 実行時間 : 100ns

1,000構造

4. 動的構造に対する FMO計算

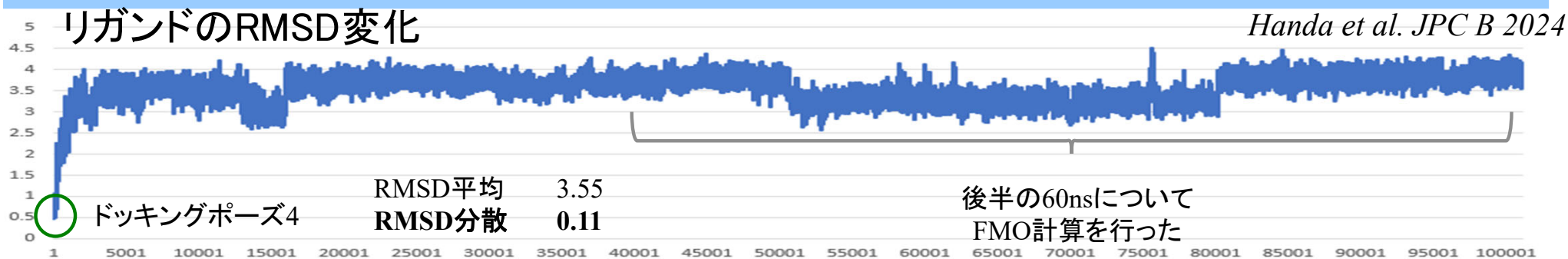
それぞれ100構造を抽出し FMO計算を実施
(100×10=1000構造)

- Program : ABINIT-MP
- Level: MP2/6-31G*
- Computer : Oakforest-PACS, 富岳
- FMOe、abmptools、BioStationViewerを解析に使用

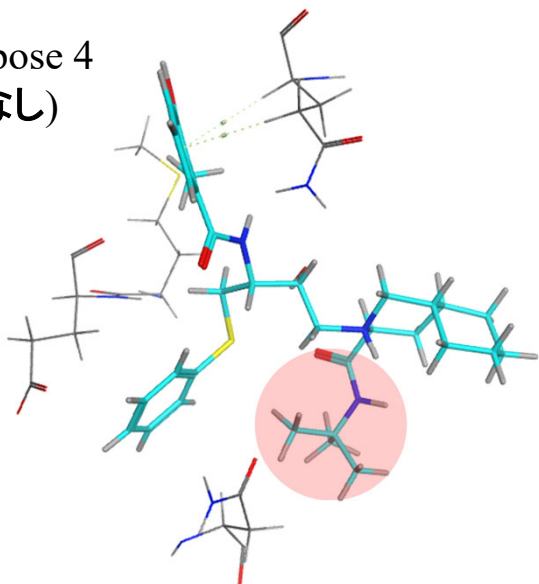
富岳



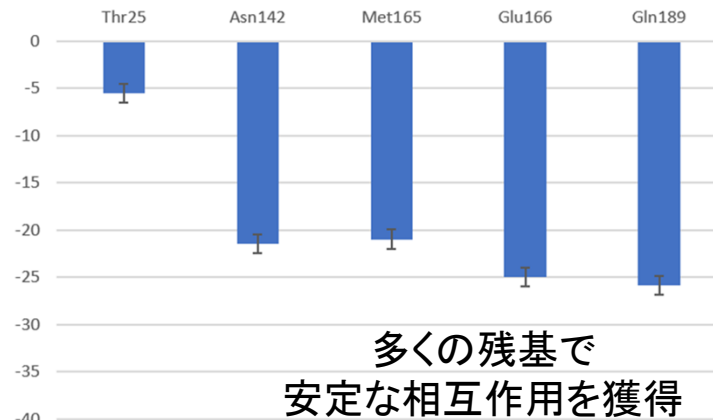
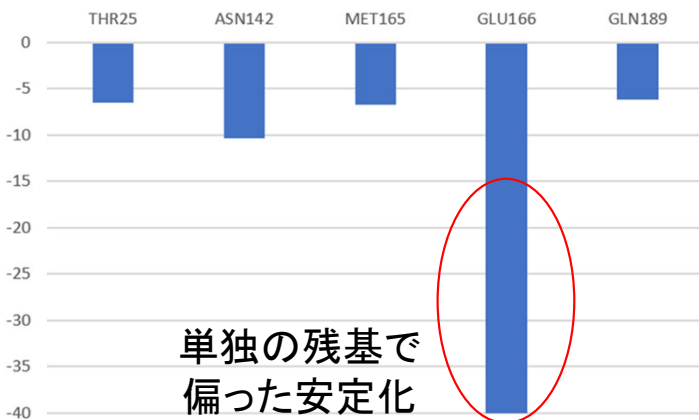
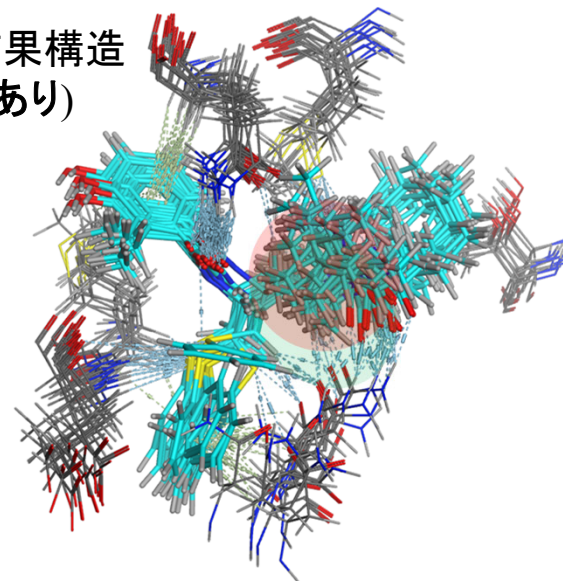
MDとFMOの融合による動的IFIE解析



ドッキングpose 4
(揺らぎなし)



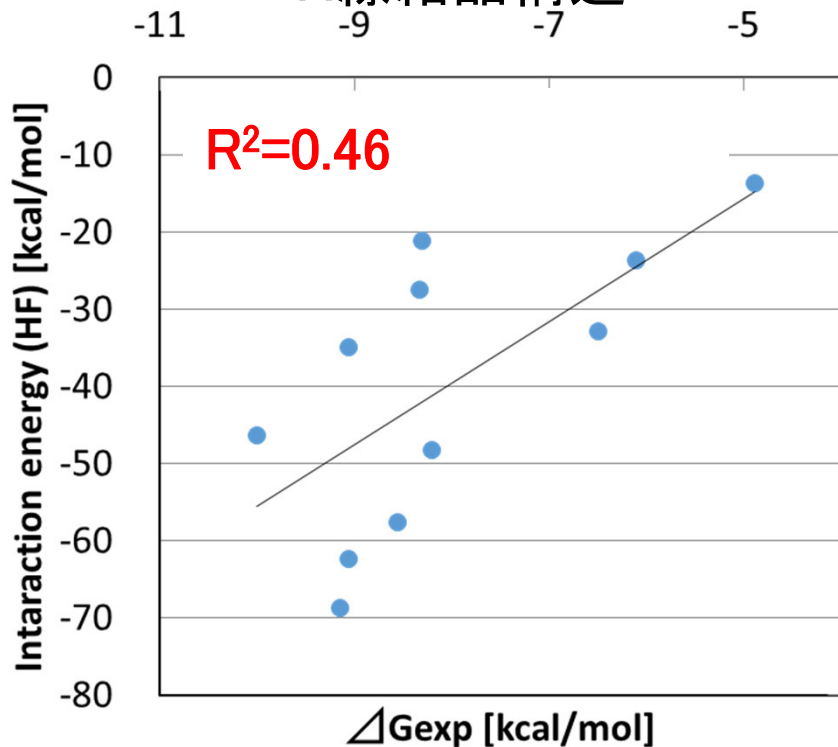
MD計算結果構造
(揺らぎあり)



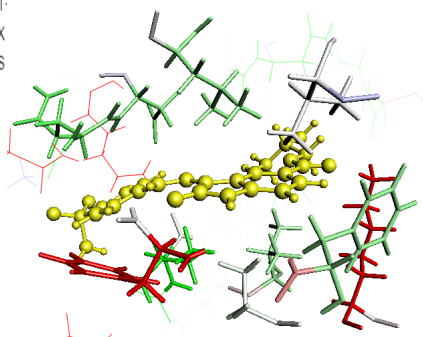
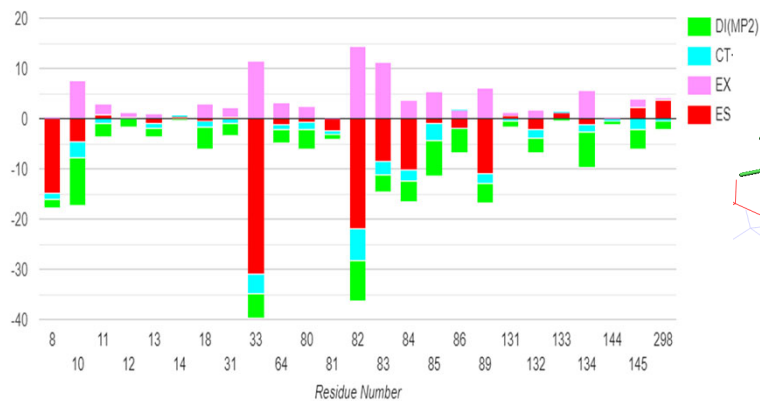
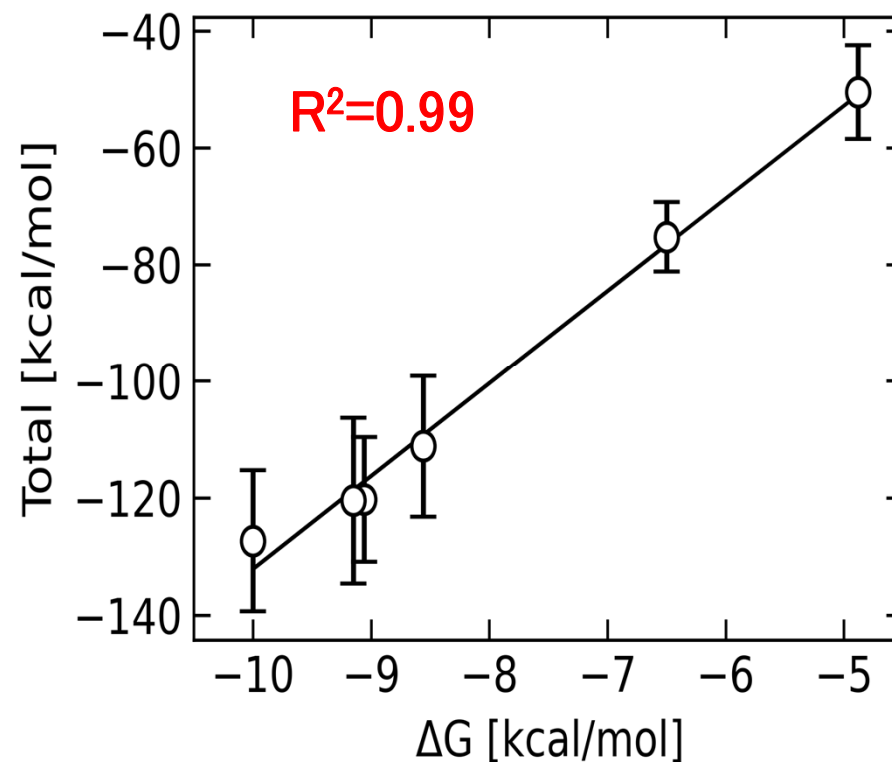
動的FMO解析によるCDK2-阻害剤の結合性予測

Takaba et al. J. Comp. Chem., 43, 1362 (2022). **KDBBとの連携により実施**

X線結晶構造



MDサンプリング構造



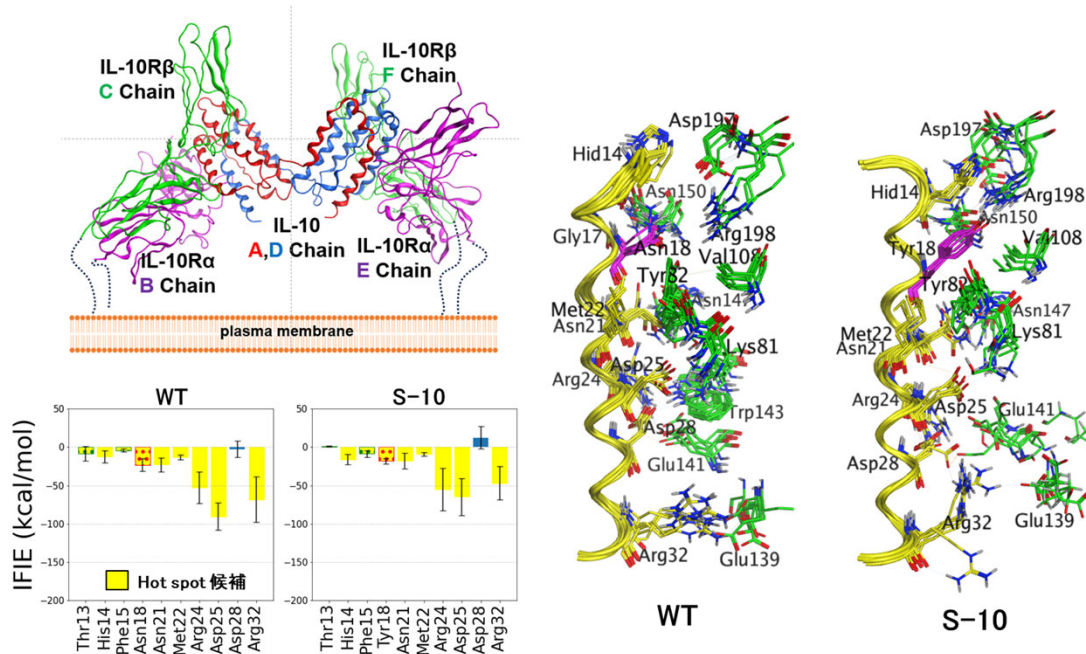
- 50ns MD × 5本 / cpd)
- 12 -50 nsから 2 ns間隔でサンプリング (100構造 / cpd)
- Water shell: 6Å

【FMO-MP2/6-31G*】

タンパク質—タンパク質間相互作用 (PPI)

PPIにおける「ホットスポット」の探索

● インターロイキン10 (IL-10) と受容体



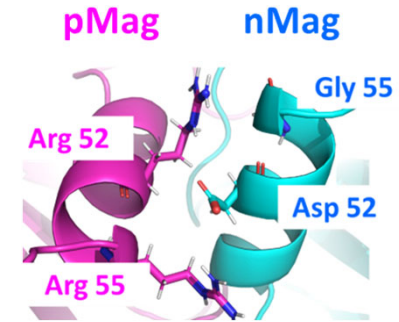
PPIの定量的解析 → 創薬設計指針

● 抗原-抗体系のFMO-DXの開発 (理研Gr)

- PDBに登録されている全2,800構造のうち294構造
- AlphaFold2 予測構造 1,200

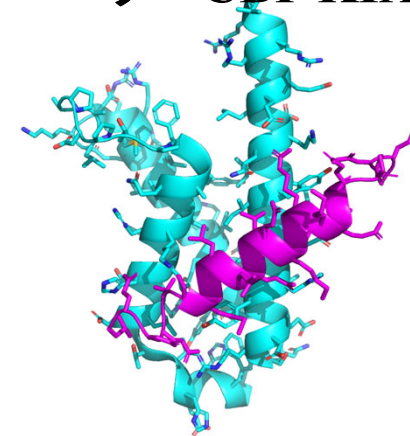
現在データ収集→ エピトープ予測モデルの開発へ

● 光受容タンパク質 (pMag-nMag) (東大Gr)



暗状態と明状態の相互作用の違いを解明 → 光遺伝学への応用

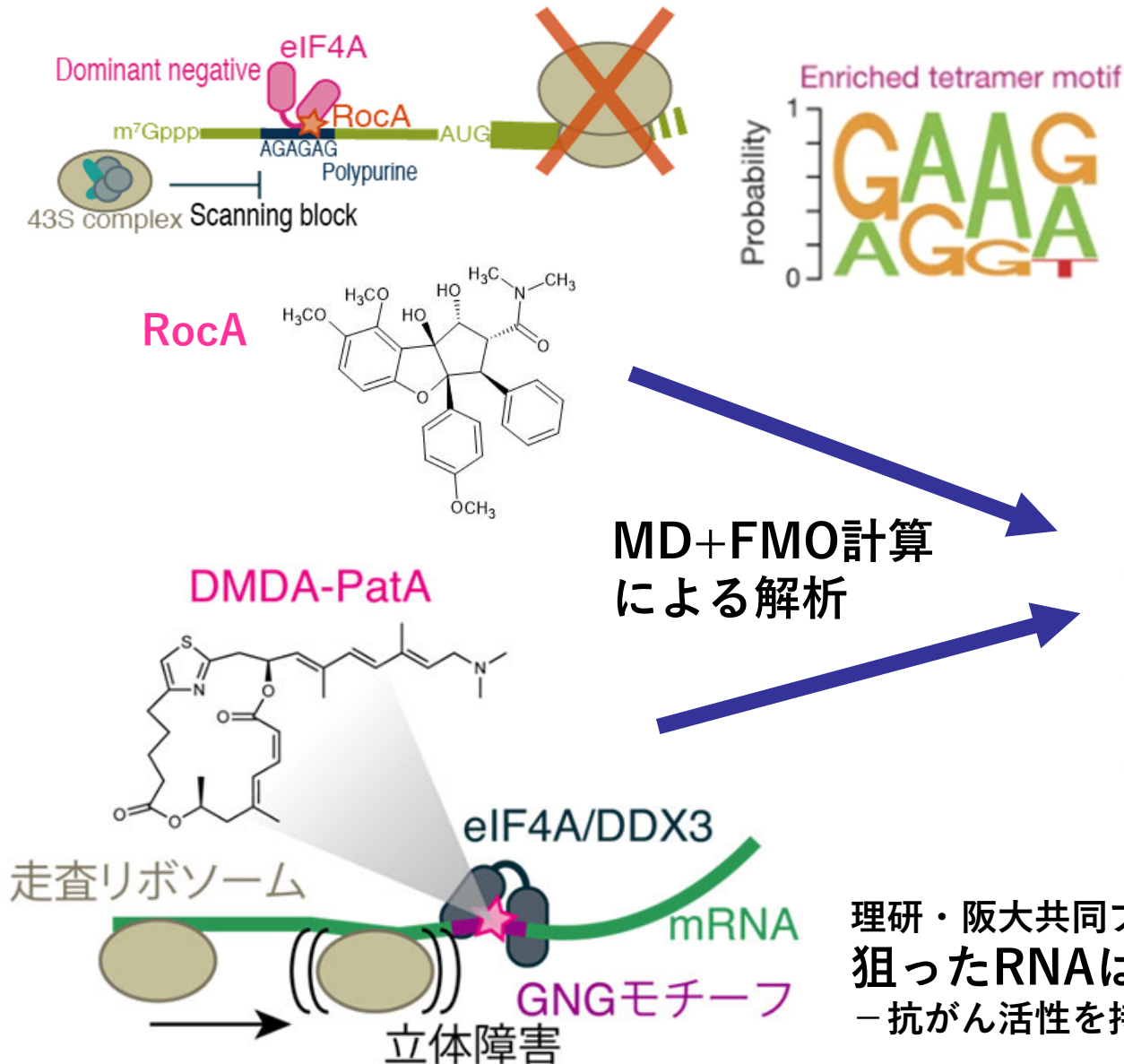
● 転写因子c-MybとコアクチベーターCBP KIXドメイン (東大Gr)



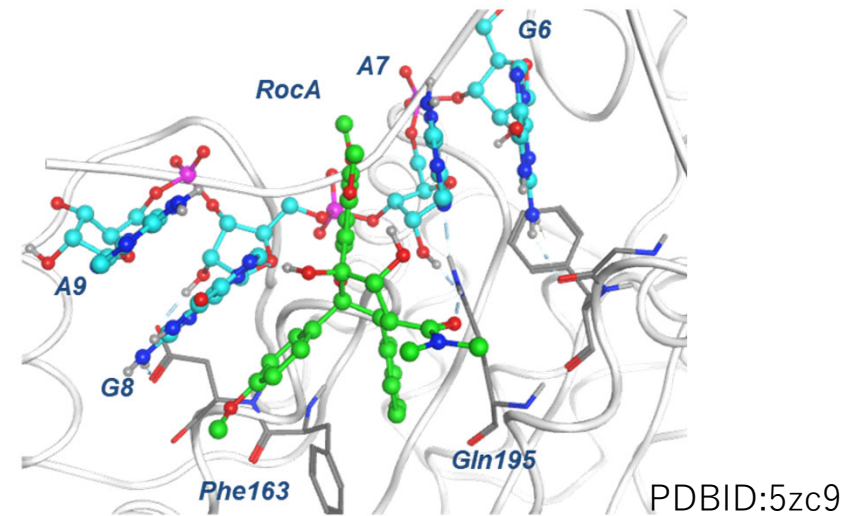
KIXドメインを模するペプチドを開発中 → より阻害能の強いペプチドの設計

翻訳開始因子eIF4A-RNA -阻害剤

共同研究者：岩崎、伊藤（理研）
計算担当：半田（星薬／阪大）



- 結晶構造のFMO解析より相互作用の解釈を支援 *Mol. Cell* 73 738 e9 (2019)
- MD+FMO計算からポリプリン配列特異的に結合するメカニズムを説明
→ 論文準備中

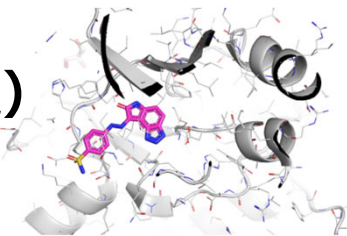


理研・阪大共同プレスリリース
狙ったRNAは逃さない！
— 抗がん活性を持つDMDA-PatAの作用メカニズムを説明 —

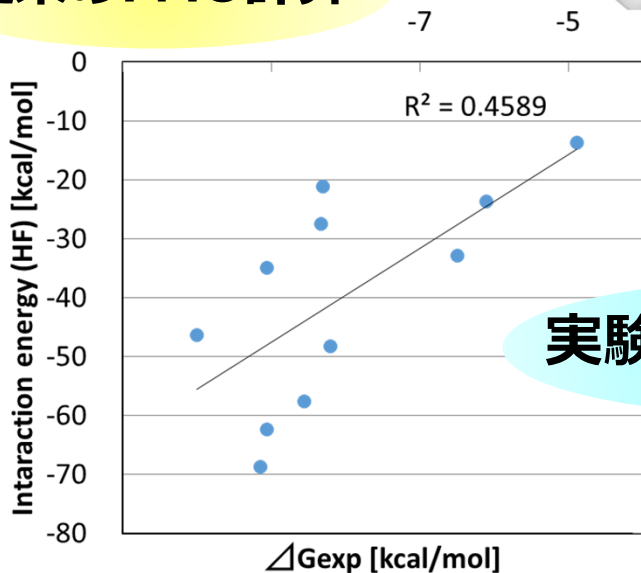
Nature Communications 15, 7418 (2024)

低分子創薬 ~ 従来法からの進展

結晶構造に基づく
構造活性相関 (静的構造)



従来のFMO計算

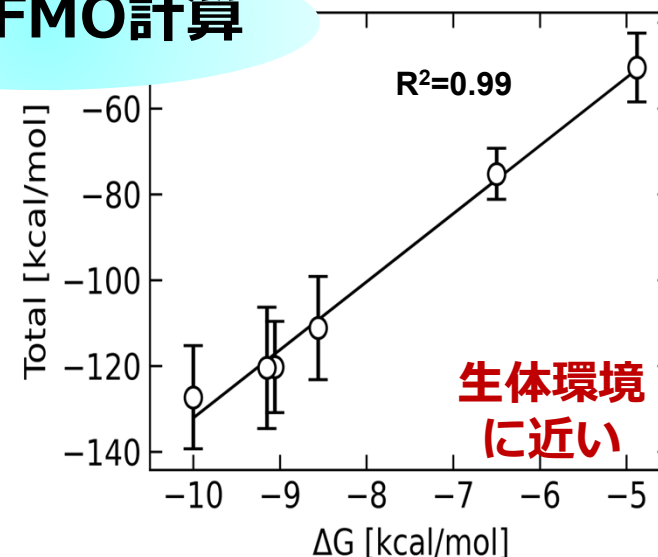


実験研究との連携

水中の揺らぎ構造に基づく
構造活性相関 (動的構造)

Takaba et al. J. Comp. Chem., 43, 1362 (2022).

MD+FMO計算

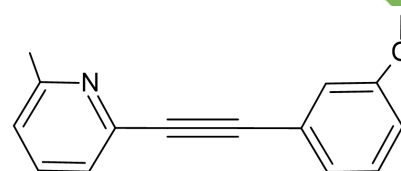


構造生成AIの活用

新規骨格の創出

インシリコスクリーニング

数十万構造~の探索



C1=CC=C(C=C1C#CC2=CC=CC(=N2)C)CC

ChemTSを用いて化合物を予測

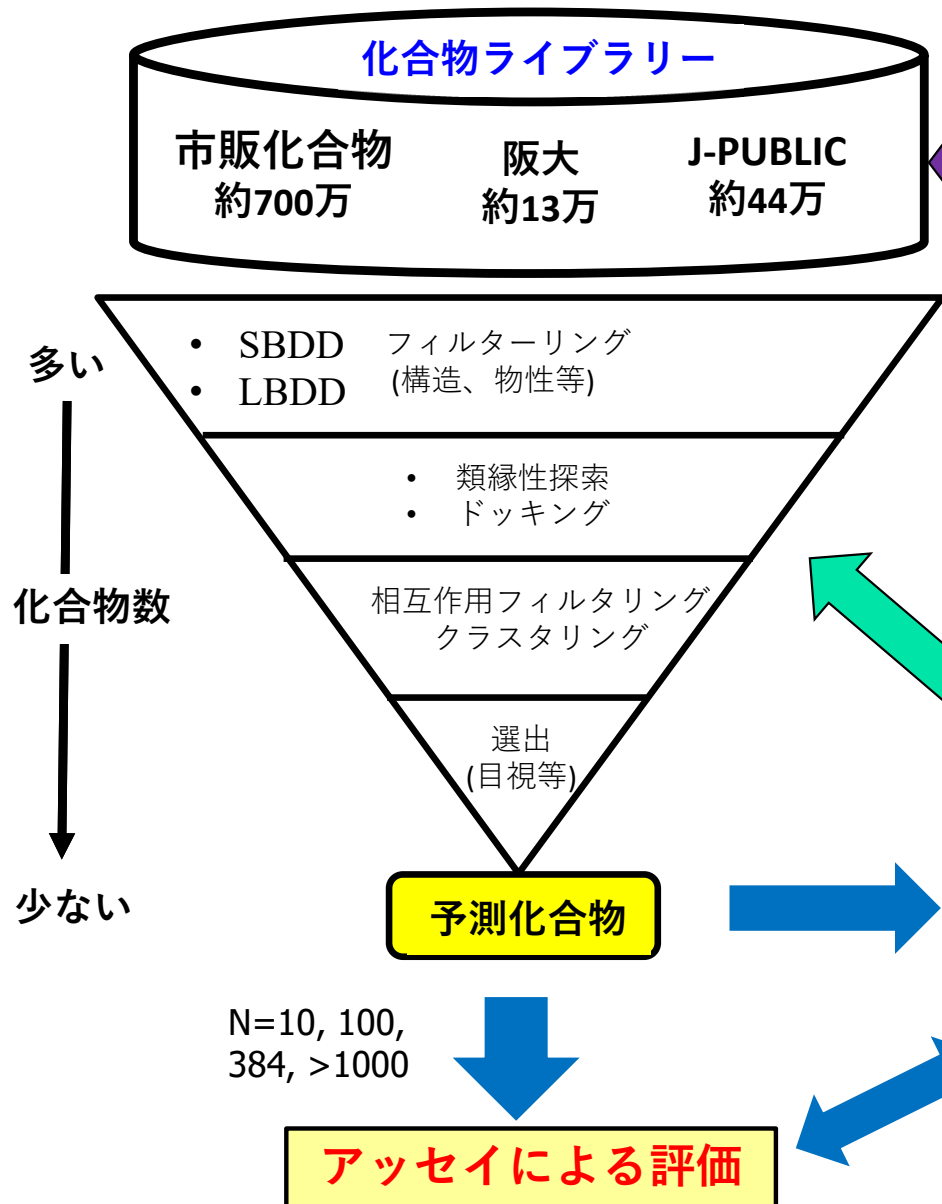
(計1万化合物)

ligand efficiencyで化合物を絞る (計100化合物)

FMO計算、歪みエネルギー、 ΔE_{bind} を算出する

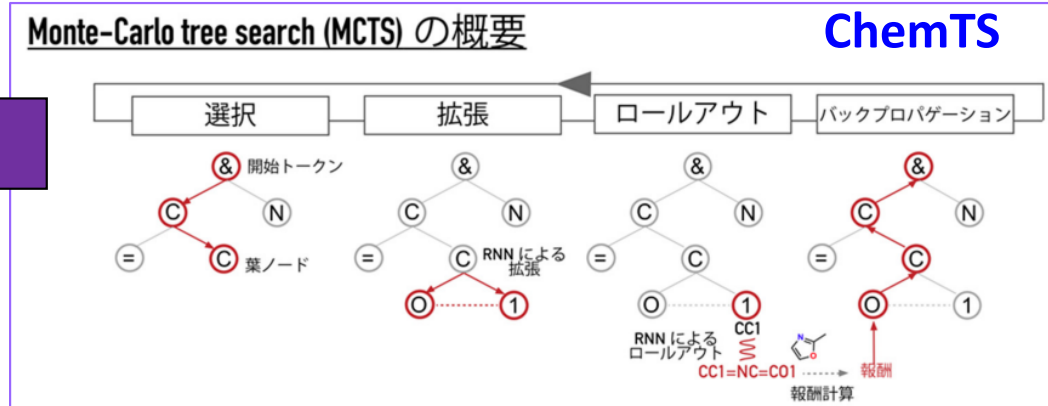
化合物のスクリーニングとFMOベースの評価

インシリコスクリーニング



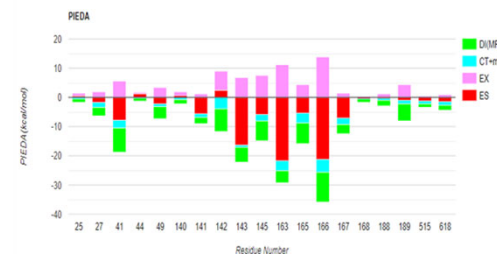
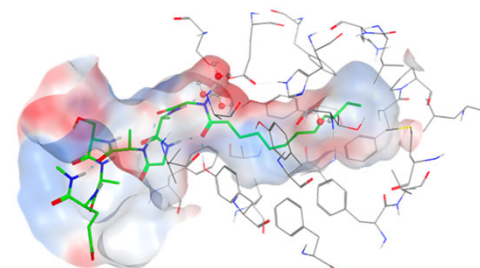
AIによる構造生成

(数百万～数千万以上)



石田、吉澤、寺山、SAR NEWS, 44 (2023)より

FMO計算による結合性評価



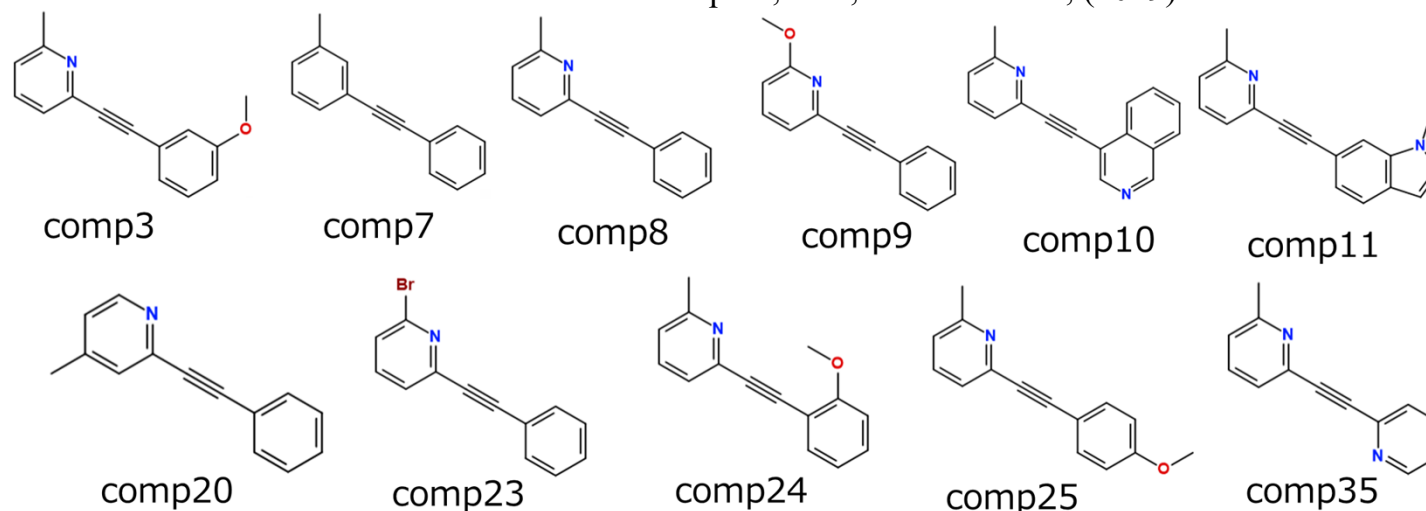
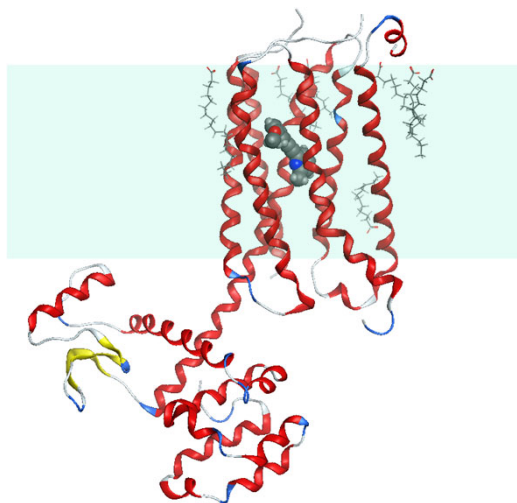
- 結合性予測
- 分子間相互作用エネルギーの定量的な評価

構造ベースの化合物のデザインへ

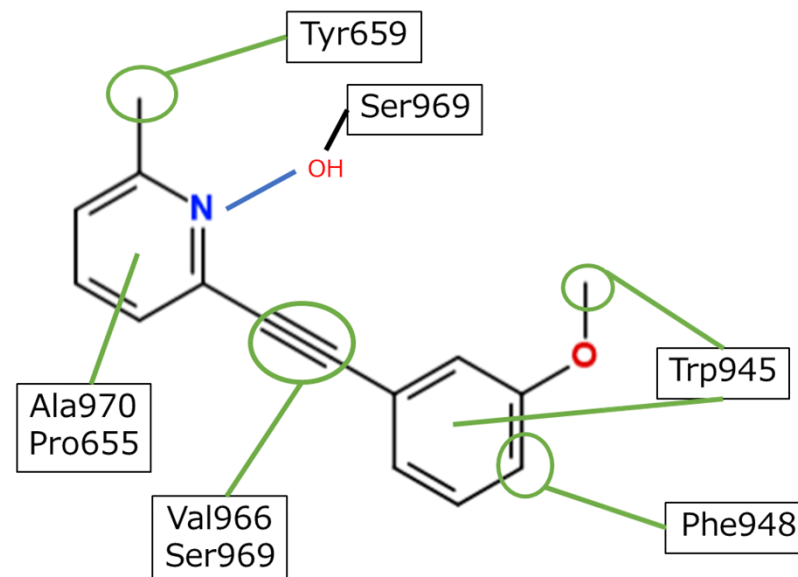
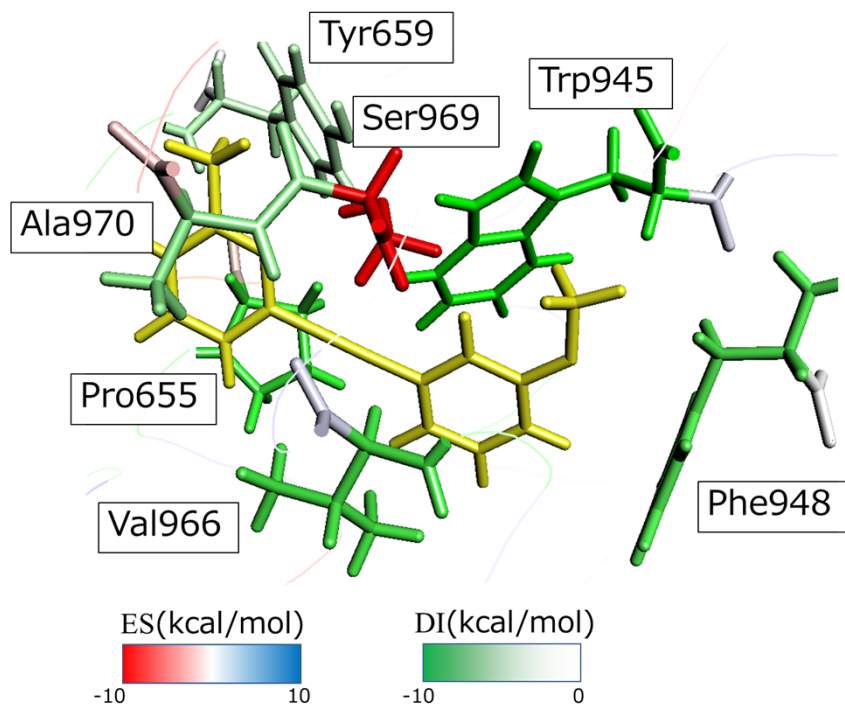
代謝型グルタミン酸受容体5(m-Glu5)とリガンドとの相互作用

小田島(星薬大)ら

John A. Christopher, et al, J. Med. Chem, (2019).



結合エネルギーとpIC₅₀との相関: R²=0.477

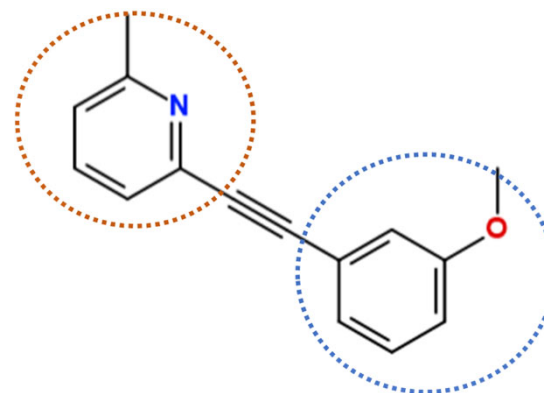
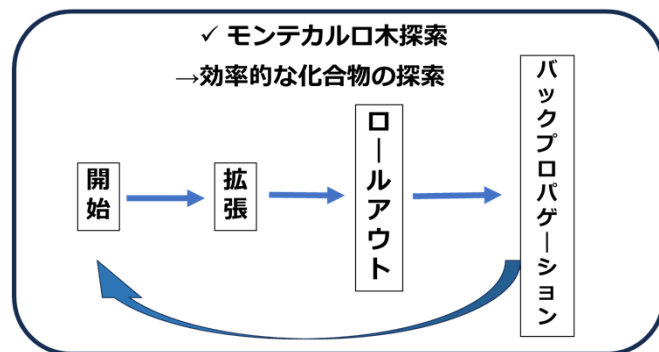


青線は水素結合、緑線はCH- π 相互作用
または π - π 相互作用を示す

ChemTSでを用いた AIベースの構造生成

小田島(星薬大)
本間研(理研)、他

- ◆ 化合物をsmiles形式で表記し、与えられたrewardが最大になるように文字列を加えていく。



ChemTSを用いて化合物を予測
(計1万化合物)

ligand efficiencyで化合物を
絞る (計100化合物)

FMO計算、歪みエネルギー、
 ΔE_{bind} を算出する

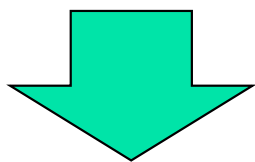
- Reward: ドッキングスコア(GRIDE)
- 実行時間: 12時間
- C value : 0.01
- 分子量 : 300

1回の実行で約1,000化合物を生成

ChemTSで発生させた構造の評価

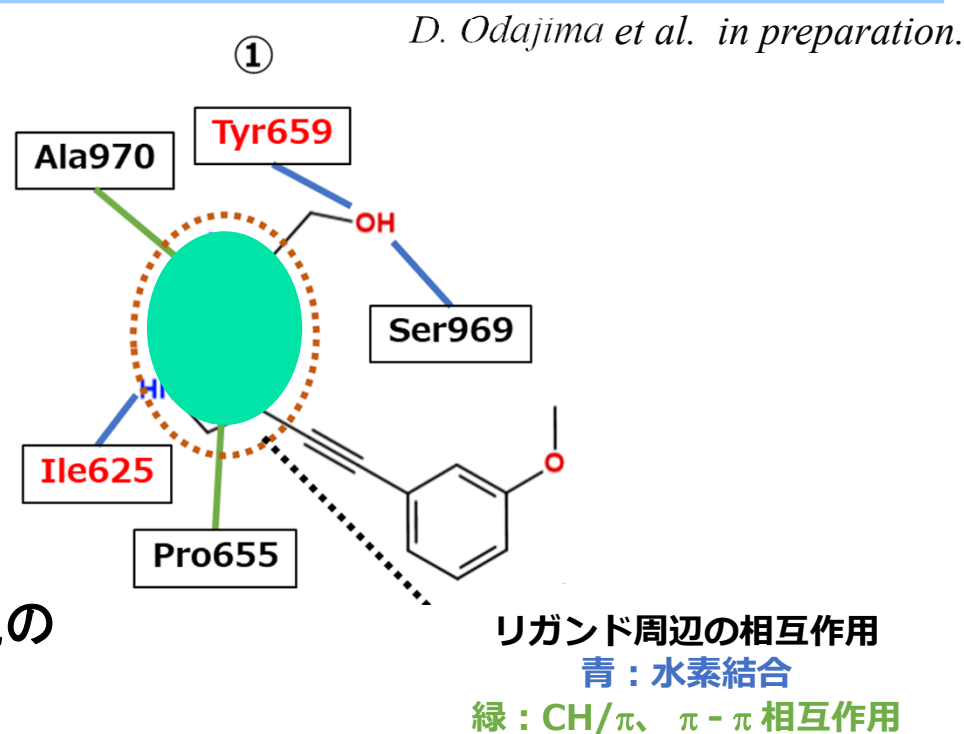
構造	①	②	③
分子量	279	250	228
ChemTSスコア	10.37	9.98	9.39
Total IFIE (kcal/mol)	-106.46	-99.54	-94.16
歪みエネルギー (kcal/mol)	10.23	6.08	10.57
ΔE^{bind} (kcal/mol)	-96.23	-93.46	-83.59

- 45化合物が、Comp3の E_{bind} を上回った
- 発生構造部分でIle625、Ile651、Tyr659と新規の水素結合を獲得→新規の骨格が発生



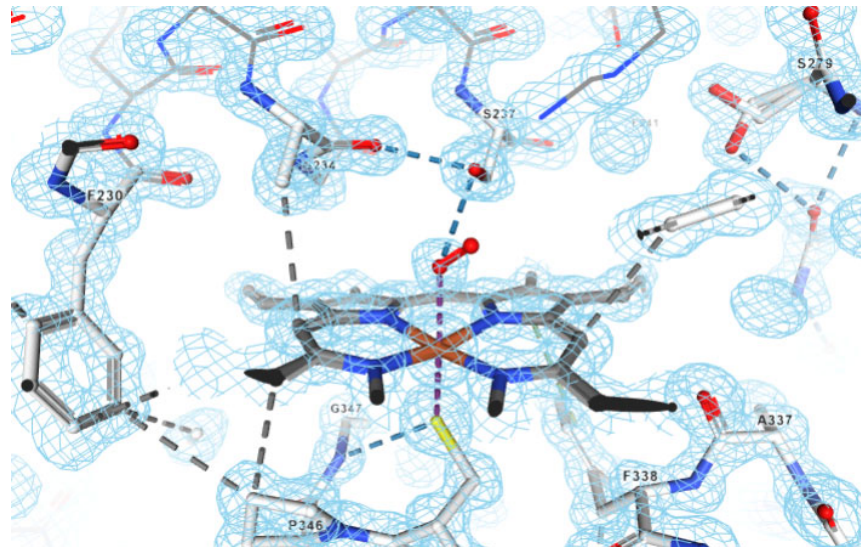
合成、アッセイへ!!

AI化合物生成 → ロボット合成 → 評価
のプロセスが進行中



合成ロボット@阪大薬

構造生物学との連携 FMOデータベース (FMODB)



✓ 構造の refinement や validation

タンパク質の立体構造データベース

Protein Data Bank (PDB)

<https://www.rcsb.org/>

世界中で解析された情報が集約されており、誰でもアクセスできる

The screenshot shows the top navigation bar of the RCSB PDB website. It includes a dark blue header with the following elements:

- Navigation menu: RCSB PDB, Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, Learn, About, Documentation, Careers, COVID-19
- Buttons: MyPDB, Contact us
- Search bar: 225,946 Structures from the PDB, 1,068,577 Computed Structure Models (CSM), 3D Structures, Enter search term(s), Entry ID(s), or sequence, Include CSM, Search icon
- Footer: Advanced Search | Browse Annotations, Help
- Logos: PDB-101, PDB, EMDDataResource, NAKB, wwPDB Foundation, PDB-Dev
- Social media icons: Facebook, Twitter, YouTube, LinkedIn
- Banner: Access Computed Structure Models (CSMs) of available model organisms, Learn more

A vertical navigation sidebar on the left side of the page with a dark blue background and white text and icons:

- Welcome
- Deposit
- Search
- Visualize
- Analyze
- Download
- Learn

RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB) enables breakthroughs in science and education by providing access and tools for exploration, visualization, and analysis of:

- Experimentally-determined 3D structures from the **Protein Data Bank (PDB)** archive
- Computed Structure Models (CSM)** from AlphaFold DB and ModelArchive

These data can be explored in context of external annotations providing a structural view of biology.

A promotional banner for PDB-101 Training. It features the text "Explore NEW" and "PDB-101 Training" with icons representing search, visualization, and deposit.

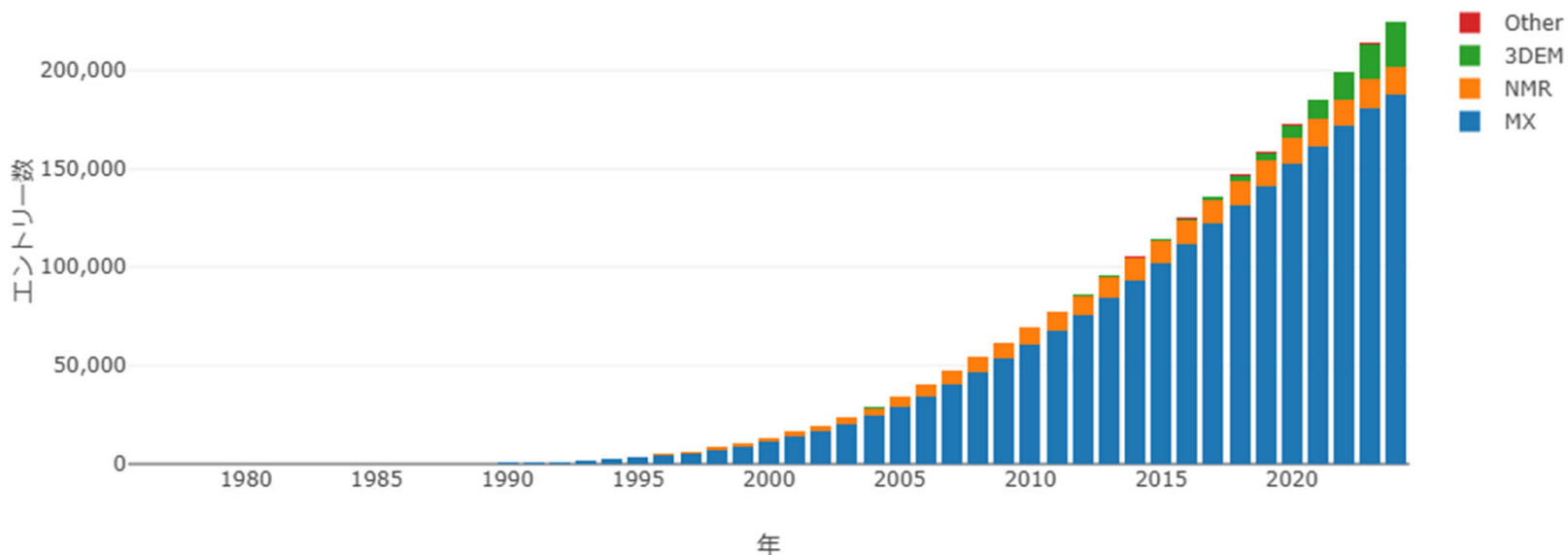
wwPDB Members:



October Molecule of the Month graphic featuring a 3D molecular model of a protein structure. The model is composed of two main parts: a top part colored in orange and yellow, and a bottom part colored in pink. The text "October Molecule of the Month" is at the top, and "Angiotensin and Blood Pressure" is at the bottom.

生体高分子・タンパク質の構造解析

実験手法別の公開PDBエントリー数



X線構造解析
(中性子線)

固体(結晶)

NMR解析

液体

クライオ
電子顕微鏡

低温凍結
(単粒子解析)



FMO
単粒子解析

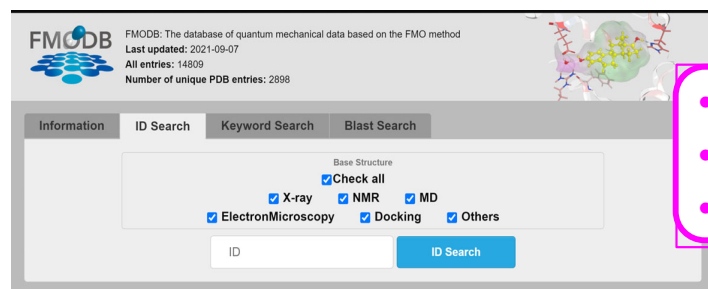
AlphaFold
構造予測

*Structure & Interaction
basis*

FMOデータベース (FMODB)

<https://drugdesign.riken.jp/FMODB>

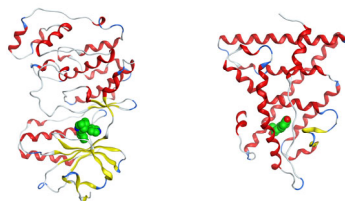
- 世界初のタンパク質の量子化学計算DB
- 37,386エントリー(7,781 PDB)を公開中
- 簡易的にWebインターフェース上でIFIE解析可能
- FMO計算結果一式ダウンロード可能



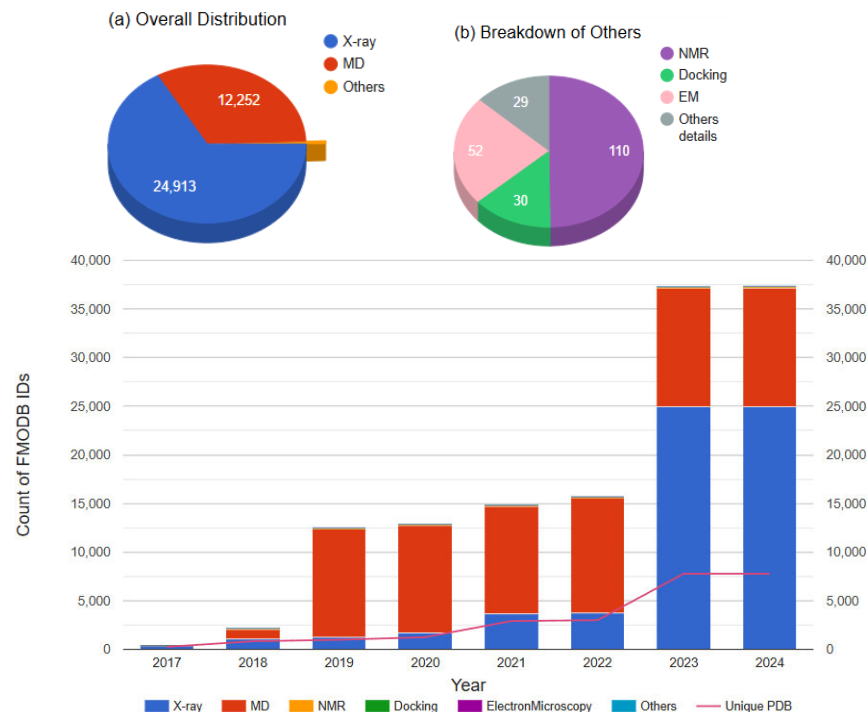
• FMODB ID
• PDB ID
• UniProt ID

Category

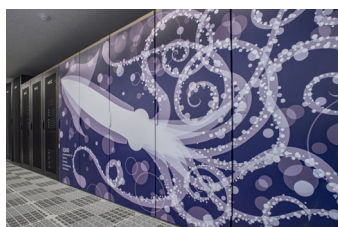
COVID-19(716)
└ Parainfluenza virus(4)
└ Main protease(390)
└ ADP-ribosyltransferase(20)



Takaya D, et al., *J. Chem. Inf. Model* 61, 777-794 (2021).



2023年度～ タンパク質の基本フォールドの網羅的解析とDB構築



サイバーメディアセンター

SQUID
Supercomputer for Quest to Unsolved Interdisciplinary Datascience



FMODB



PDBj
Protein Data Bank Japan

蛋白質研究所

All 阪大による緊密な連携!

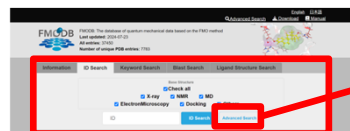
FMODB: PDBjとの連携と解析機能強化

阪大蛋白質研究所・PDBjの栗栖先生と (2023年4月)



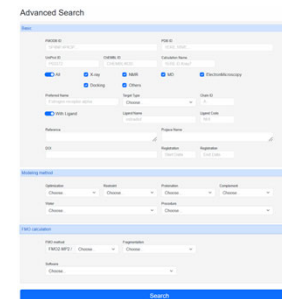
FMODB検索機能

- (1) 基本検索機能 (HPに実装) (2) Advanced検索機能 (別ウィンドウ立ち上げ)



タブで検索機能移動

- ID検索 (e.g., PDB, UniProt, FMODB)
- Keyword検索
- Blast検索
- 化合物構造検索



複数条件で検索可能

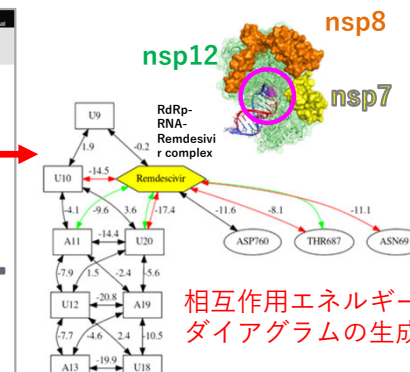
- ID検索 (e.g., PDB, UniProt, FMODB)
- Keyword検索
- Blast検索
- 化合物構造検索
- 構造前処理手法
- FMO計算手法

IFIEダイアグラム解析機能

- (1) 各エントリーページ (2) IFIE diagramの設定画面 (3) IFIE diagramの描画



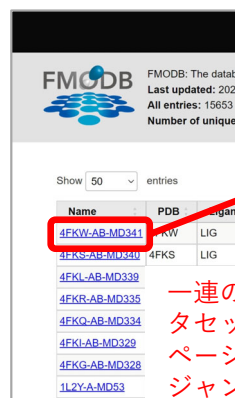
IFIE diagramの Webインターフェイスへジャンプ



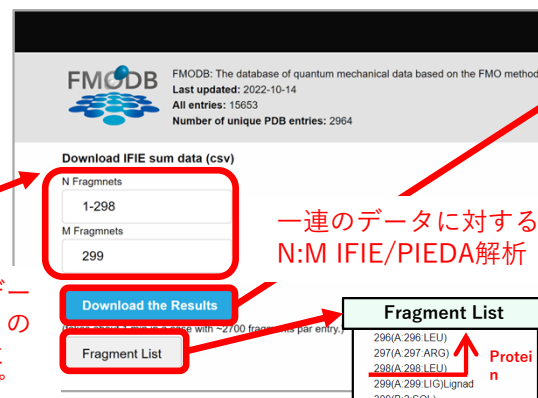
相互作用エネルギーダイアグラムの生成

一連のデータに対するリガンド-タンパク質間のIFIE/PIEDA解析機能

- (1) 一連のデータセットリスト (2) 一連のデータに対するIFIE/PIEDA解析機能 (3) IFIE/PIEDAデータのダウンロード (CSVファイル)



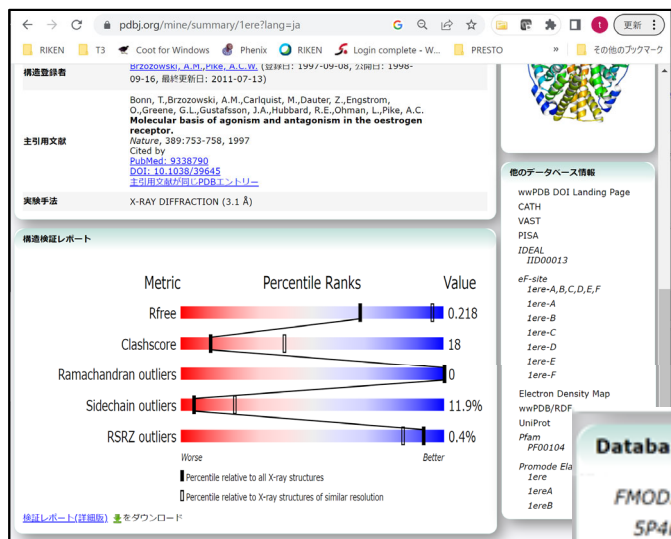
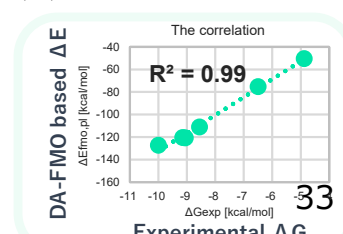
一連のデータセットのページにジャンプ



一連のデータに対する N:M IFIE/PIEDA解析

	A	B	C	G	H
FMODB_ID	Model	MD_Time	IFIE_SUM	PIEDA_ES	
1	7G5SK	mdl_12ns	12	-170.18	-147.6
2	M30J2	mdl_14ns	14	-142.07	-131.05
4	PGGK2	mdl_16ns	16	-138.18	-125.51

(4) 動的平均IFIE/PIEDA解析



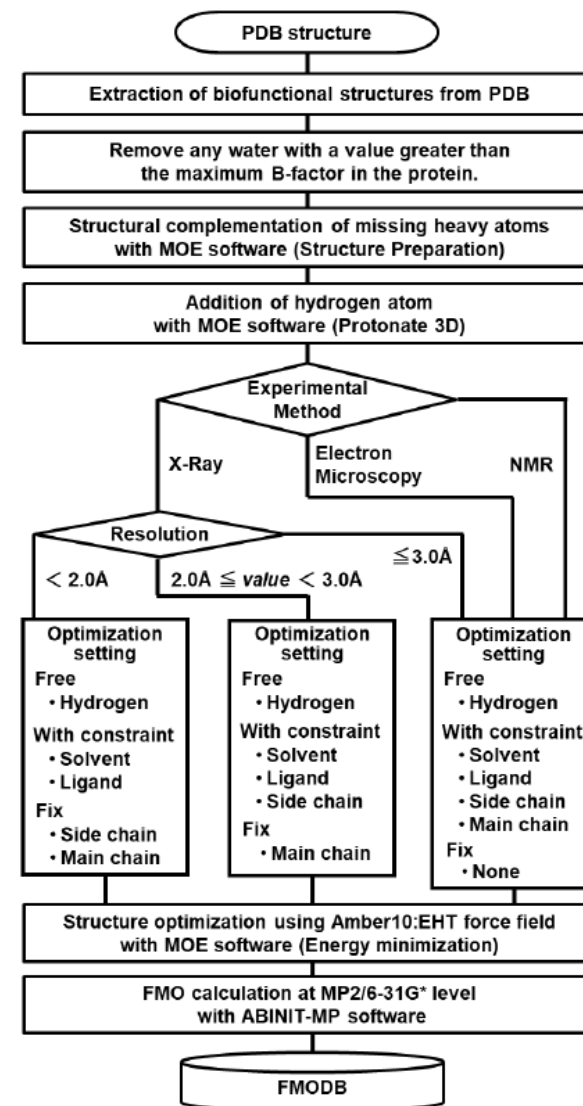
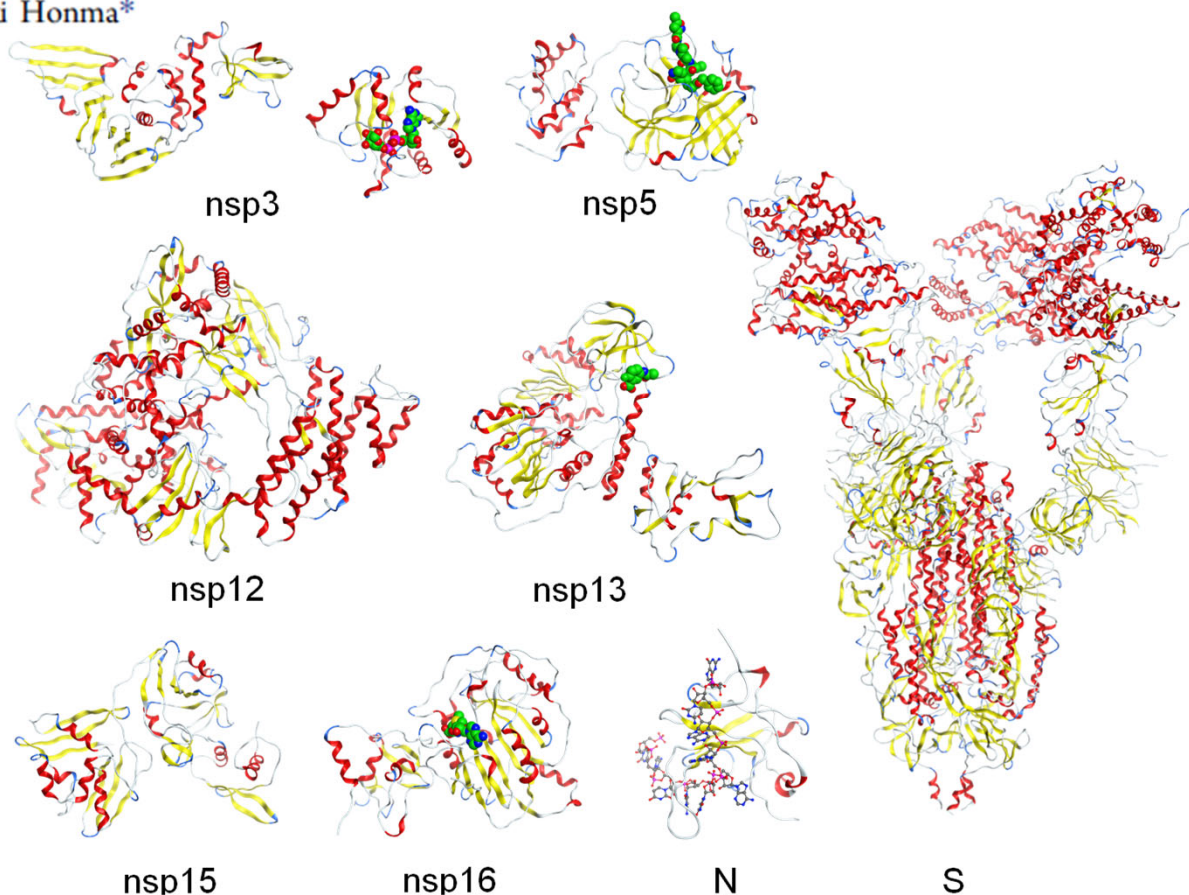
PDBjとFMODBの相互リンクを実施



COVID-19関連タンパク質の量子化学計算結果の公開

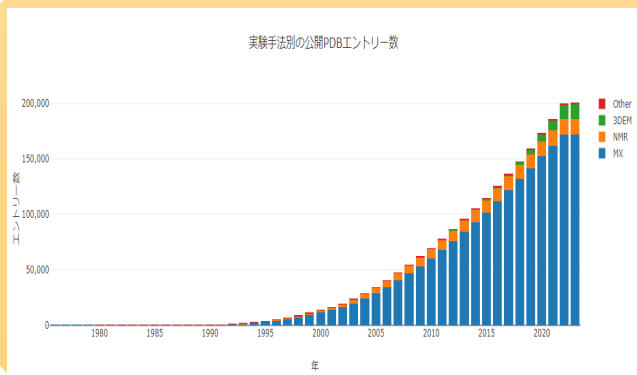
Special Features of COVID-19 in the FMO DB: Fragment Molecular Orbital Calculations and Interaction Energy Analysis of SARS-CoV-2-Related Proteins

Kaori Fukuzawa,* Koichiro Kato,* Chiduru Watanabe,* Yusuke Kawashima, Yuma Handa, Ami Yamamoto, Kazuki Watanabe, Tatsuya Ohyama, Kikuko Kamisaka, Daisuke Takaya, and Teruki Honma*

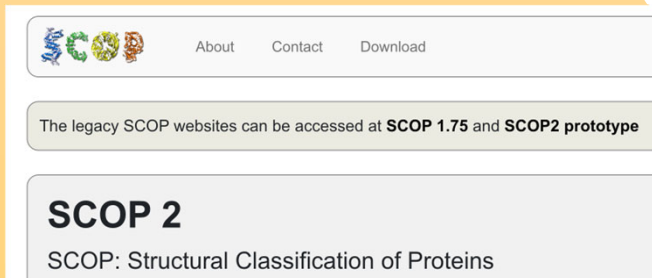


タンパク質基本フォールドの網羅的計算解析(2023~)

生体高分子の実験構造は増加傾向



タンパク質フォールドのDB: SCOP 2



- Family区分で**6000弱**の構造情報

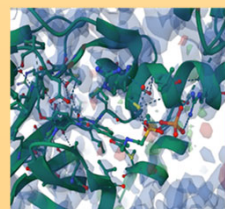
Takaya et al., submitted.



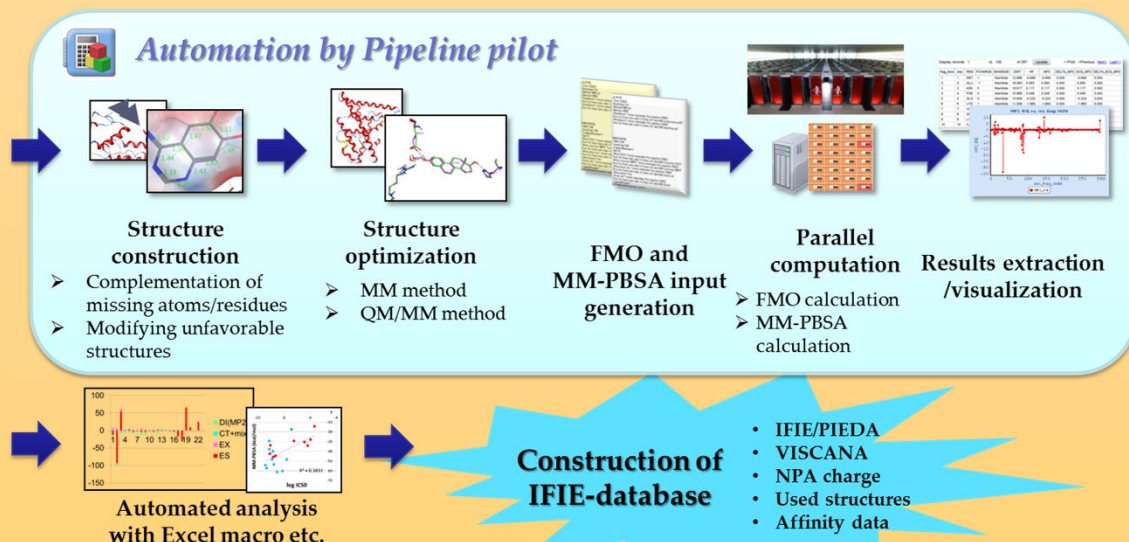
FMO自動化プロトコル

- 煩雑な前処理を自動化

量子化学的観点の相互作用データの大幅な拡充を目指す



PDB登録構造



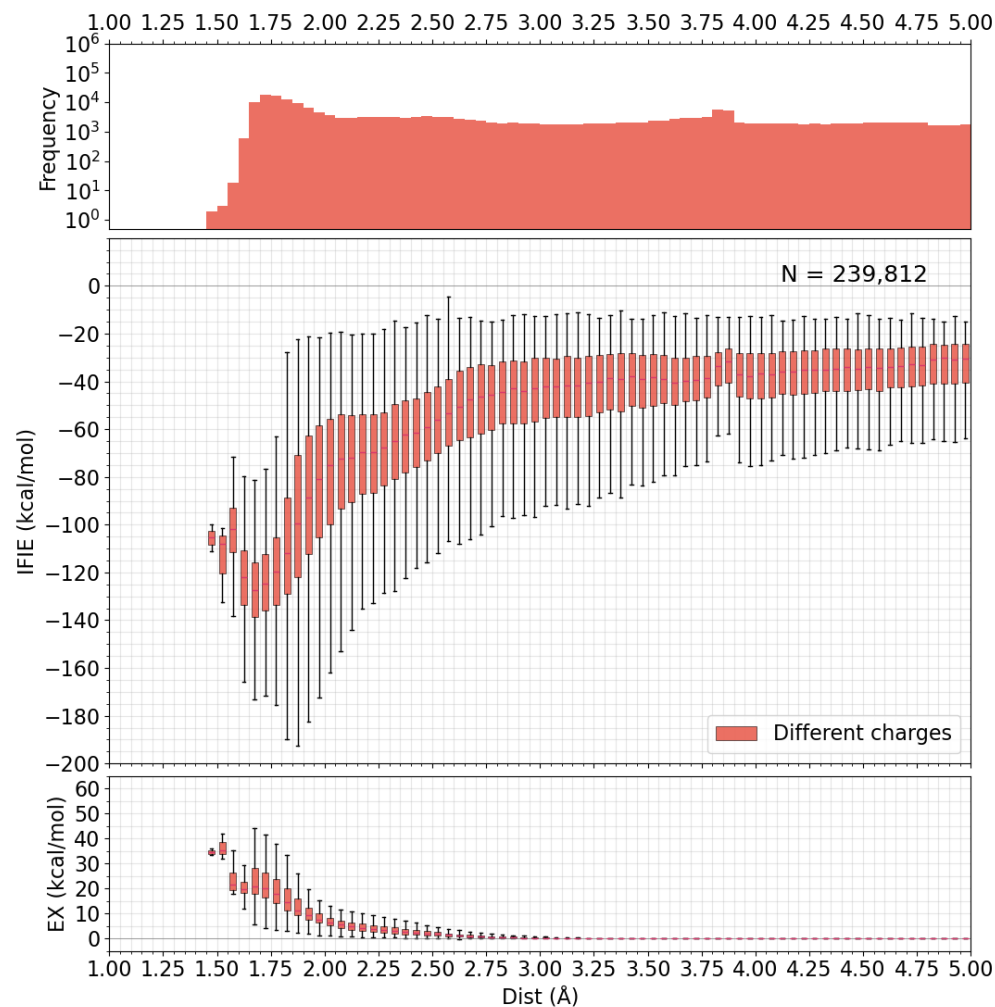
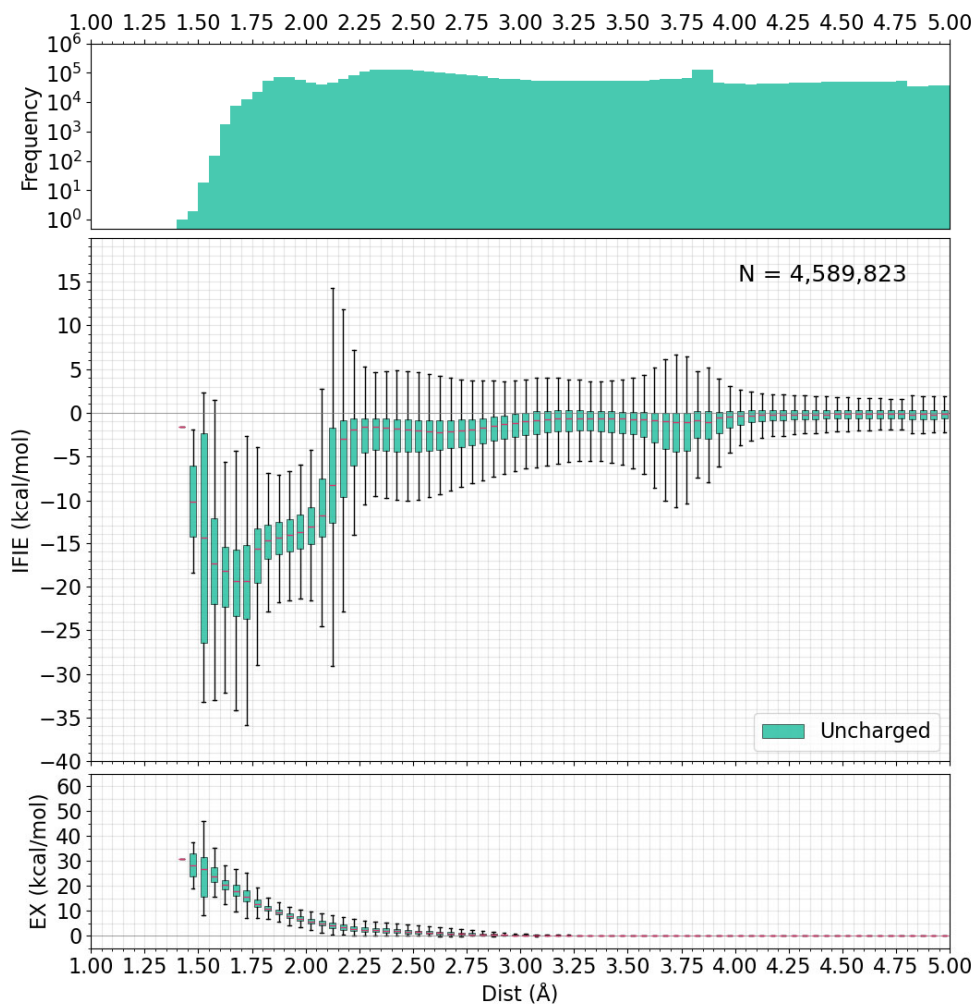
- 生体高分子の多様なフォールドを考慮したIFIE/PIEDA蓄積
- 創薬分野における慢性的なデータ不足の解消 (例: AI構築用)

残基間の相互作用エネルギーと距離の関係

Takaya et al., submitted.

中性残基間 (chargeA == 0 and chargeB == 0)

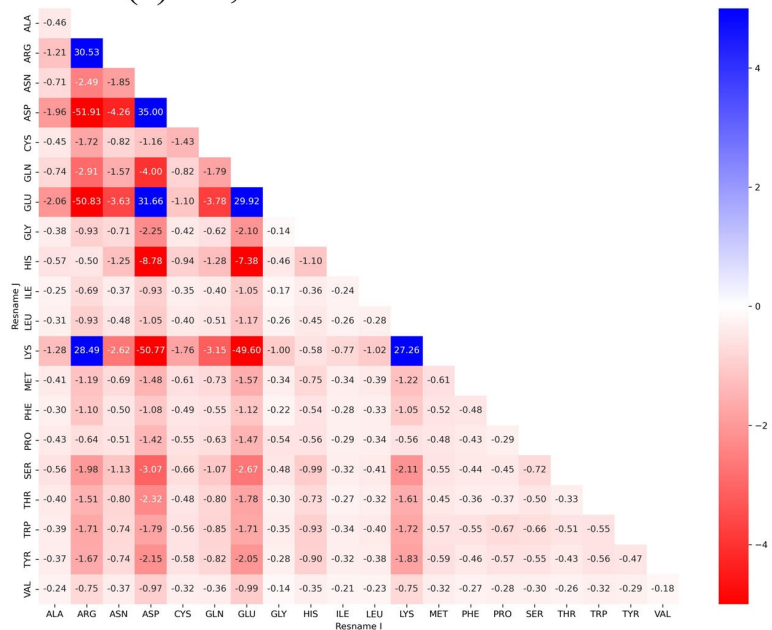
荷電性残基間 (chargeA * chargeB < 0)



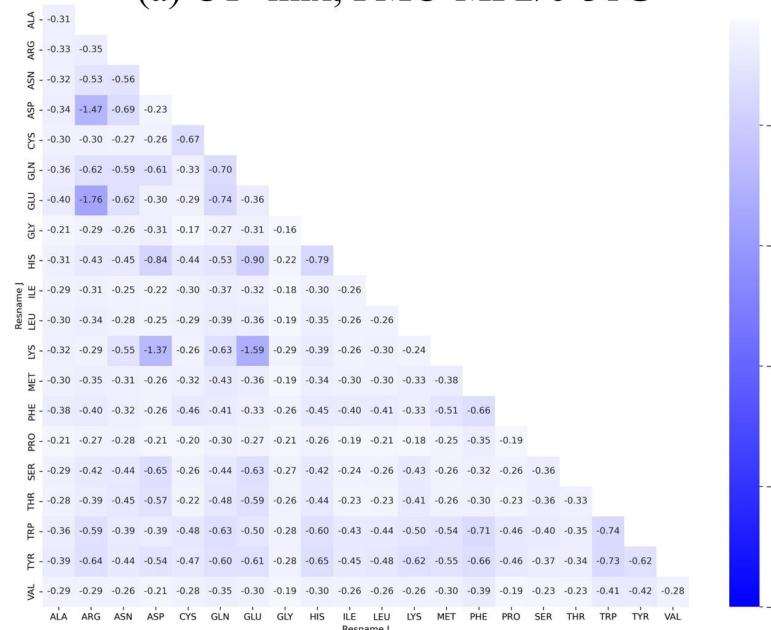
- ✓ タンパク質内部における残基間相互作用の分布が明らかになる。
- 残基ペアの種類ごとの解析

全アミノ酸ペアの相互作用エネルギーの統計解析

(a) ES; FMO-MP2/6-31G*

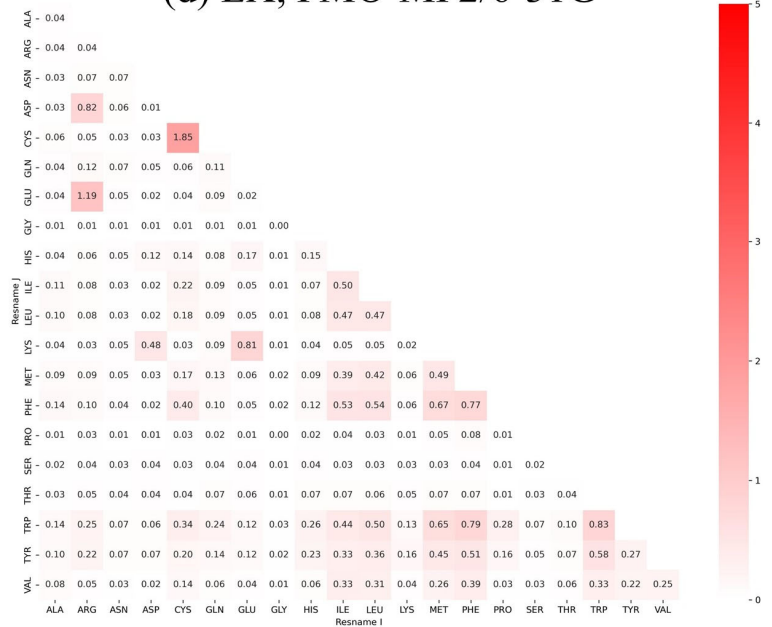


(a) CT+mix; FMO-MP2/6-31G*

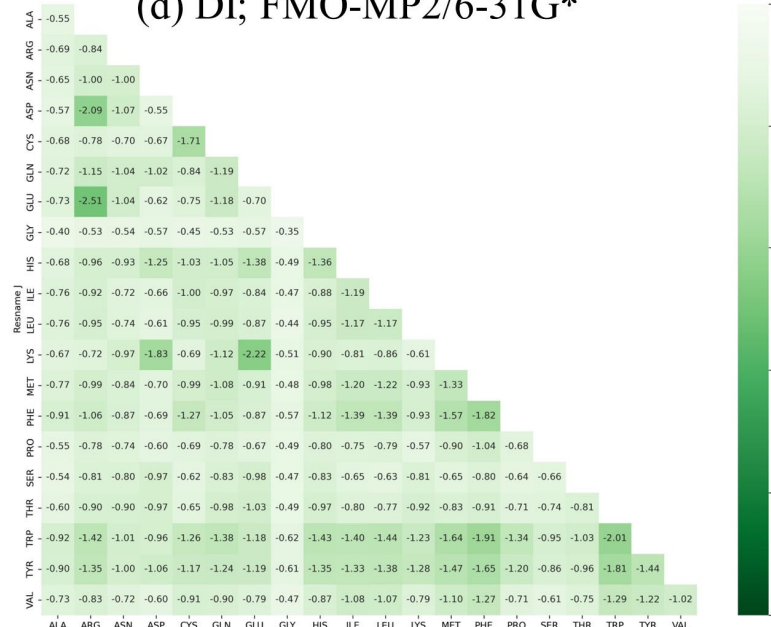


*Takaya et al.,
submitted.*

(d) EX; FMO-MP2/6-31G*



(d) DI; FMO-MP2/6-31G*



AlphaFold2 予測構造への拡張

<https://alphafold.ebi.ac.uk/>

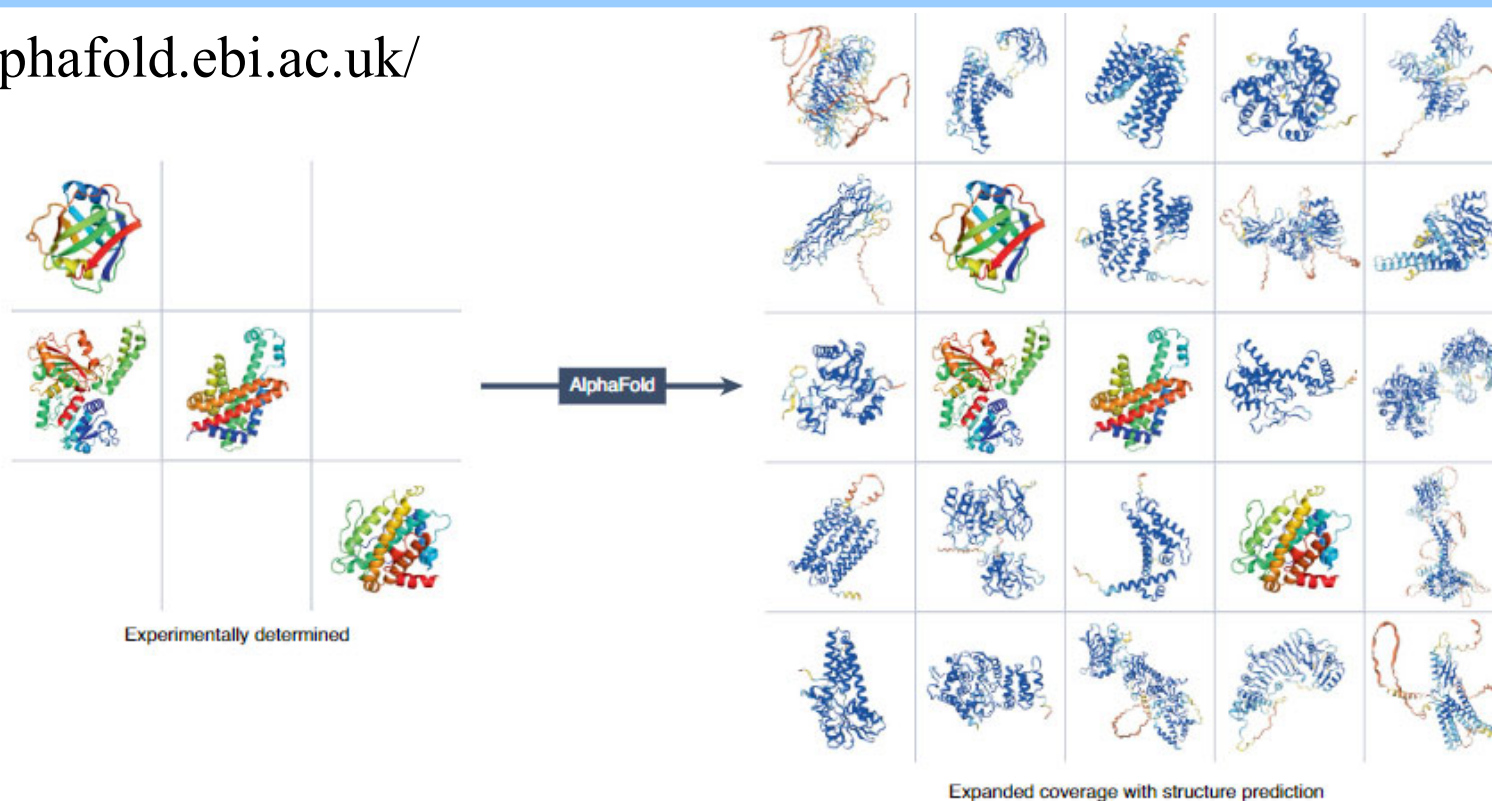


Fig. 1 | AlphaFold as an amplifier of sparse experimental data. Schematic illustration of the role of machine learning, which converts a smaller amount of experimentally determined data into a comprehensive set of experimental predictions.

Jamper & Hassabis, *Nature method* 19, 11-26 (2022)

実構造
220,000

<<

予測構造
200,000,000

基本フォールドを含むAF2予測構造についても網羅的に計算実施中 (2024)

FMODDでは、CBI学会FMO研究会やAMEB-BINDSと連携して精力的に活動中

- スタートアップ講習会シリーズ
全6回(5-6月) オンライン開催
基礎知識を習得

- 夏の学校
@阪大 2泊3日(2024年8月26日~8月28日)

初中級、FMO基礎から富岳でのFMO&MD計算の実行、ドッキング、統計解析など
ポスターセッション、口頭発表セッション 例年、約50名が参加(企業からも数名)

- FMO研究会
講演会、チュートリアル
http://cbi-society.org/home/study_fmo.html



- 社会人博士
成果公開型のHPCI利用成果で学位取得
1名が博士(薬科学)を取得


FMO スタートアップ講習会



1. 「PDB、Cootなどの使い方 FMODB の紹介」(渡邊千鶴@理研) 202
 - 動画 [Youtube]:
 - [PDB の使い方、FMODB の紹介編](#)
 - Coot の使い方編: 講演者の都合により提供はありません。
 - [配布資料 \[PDF\]](#)




日時: 2024/8/26 (月) 13:00~8/28 (水) 17:00 参加費: 無料 定員: 35名
場所: 大阪大学吹田キャンパス

8/29 (月) FMO法の創薬分野への応用 (福澤 薫 (大阪大)、渡邊 千鶴 (理研)、加藤 幸一郎 (九州大))
参加者自己紹介および研究紹介 (ポスターセッション)

8/30 (火) FMO法の基礎 (北浦 和夫 (大阪大))
巨大分子の構造モデリング GUI プログラム fu 実習 (北浦 和夫 (大阪大)) 
研究紹介 (口頭セッション)

8/31 (水) MD 計算方法 & トラジェクトリ解析方法 (大山 達也 (甲南大)) 
MD 計算方法 & トラジェクトリ解析方法 (大山 達也 (甲南大)) 
エクスカージョン

9/1 (木) MD 動的構造の FMO 法による統計解析 (奥脇 弘次 (大阪大)) 

午前

午後



CBI学会FMO研究会 (2012~)

https://cbi-society.org/home/study_fmo.html



The Chem-Bio Informatics Society

情報計算化学生物学会

HOME	講演会	年次大会	研究会/若手の会	刊行物	CBIについて	入会ご案内	お問合せ
------	-----	------	----------	-----	---------	-------	------

>>English HOME

研究会

>> 研究会募集

FMO研究会

計算ADMET研究会

個別化医療研究会

オミックスの原理
研究会

FMO研究会

設立趣旨：1999年に北浦らによって開発されたフラグメント分子軌道法（FMO法）は、生体分子など巨大分子の電子状態計算法として、着実に発展しています。このFMO法が、さらに有効かつ幅広く用いられ、特に創薬において実績を積み上げられることを目指して、従来のCBI学会研究講演会とは別に、参加自由な講演会を企画するFMO研究会を設立いたします。

主査 福澤 薫 (大阪大学大学院薬学研究科)

副主査 田中 成典 (神戸大学)

FMO研究会 スケジュール

2012年度-2024年度 ★申し込み受付中

研究会	日時	テーマ
第34回	2024年 8月26日(月) -8月28日(水)	第34回FMO研究会(第3回FMODD夏の学校) /大阪大学吹田キャンパス
第33回	2023年 10月25日(水) 13:30-15:00	第33回FMO研究会(CBI2023大会 FS05「核酸創薬に向けた構造・機能解析と計算によるアプローチ」) /タワーホール船堀(東京都江戸川区船堀4-1-1)
第32回	2023年 10月23日(月) 13:00-17:00	第32回FMO研究会「FMODB実践チュートリアル-生体高分子の認識機構のFMO法による解析:FMO計算初心者から中級者に向けて-」(CBI2023大会) /タワーホール船堀(東京都江戸川区船堀4-1-1)

◆ 現在までに、34回の講演会を開催

◆ オンライン化によって参加が容易に

◆ 活動費の支援
(Zoom契約など)

謝辞

FMODD/FMODB

本間光貴(理研)
渡邊千鶴(理研)
高谷大輔(阪大)
奥脇弘次(阪大・JSOL)
加藤幸一郎(九州大)
大山達也(甲南大)
森義治(慶応大)
神坂紀久子(理研)
半田佑磨(星薬大/阪大)
宮川柊兵(阪大)
大野修(阪大)
宮岸澄真(阪大)
田中蒼大(阪大)

田中成典(神戸大)
川下理日人(近畿大)
栗田典之(豊橋技科大)
矢城陽一郎(岡山理科大)
小沢知永(キッセイ薬品工業)
上村みどり(CBI研究機構)
平井優樹(星薬大)
小田島大貴(星薬大)
上村憲汰(星薬大)
渡邊一樹(千葉大)
遠藤真弓(PRISM BioLab)
河合健太郎(摂南大)
仙石徹(横浜市大)
森下えら(Veritas In Silico)

FMODD参画機関の皆様



ABINIT-MP/BioStationの開発

望月祐志(立教大)
中野達也(RIST)
沖山佳生(神戸大)
古明地勇人(産総研)
渡辺尚貴(みずほ情報総研)
中山尚史(コンプレックス)
加藤昭史(スコーピオンテック)



製剤

米持悦生(国際医療福祉大)
東頭二郎(千葉大)
古石誉之(順天堂大)

大阪大学薬学研究科

CBI学会

- ◆ 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム事業 (BINDS) (24ama121030j0001)
- ◆ HPCI利用課題 (hp240162(富岳), hp240114 (SQUID)), 東工大TSUBAME3.0/4.0