

CBI学会計算化学研究会ワークショップ開催報告

蛋白質をターゲットに - フラグメント分子軌道法が開く世界 - 入門実習講座

CBI学会の計算化学研究会(世話人 上林正巳理事他)では、5月22日に、「蛋白質をターゲットに - フラグメント分子軌道法が開く世界 -」と題する入門実習講座を、茨城県つくば市の産業技術総合研究所で開催した。このワークショップは、上林理事の協力の下に、フラグメント分子軌道法(FMO)の創始者である北浦和夫先生(京都大学、産総研)、片倉晋一氏(第一三共)、高岡雄司氏(大正製薬)が世話人となって、準備が進められた。また、施設の利用、講師役、講演資料や計算ソフトウェアの準備も産総研のFedorov博士始め九州大学の末永正彦先生他にお世話になった。受講者は、事前に指定されたサイトに置かれた資料類を無料で入手して、可搬計算機の準備をしておくことが求められた。これらの資料はCBI学会計算化学研究会の Web page で公開している。(http://www.cbi.or.jp/cbi/jigyuu/2008.05.22.GAMESS_FMO_workshop.html)

計算対象となる系を分割して、個別に *ab initio* 計算を行うことが出来るフラグメント分子軌道法は、特にペプチドや蛋白質のような生体分子(あるいはさらに核酸など)を含んだ複合系の結合エネルギーを高い精度で計算できる方法として、Structure-based Drug Design (SBDD)を志向するDrug designerたちにも広く認知されるようになってきた。この方法をさらに普及させるためには、(1) FMOの基盤となる *ab initio* 計算ソフトウェア環境をどう整えるか、(2) 大規模な計算のための並列計算機環境をどう構築するか、が問題になる。前者に関しては、創始者の北浦教授らのグループが、GAMESSを利用するシステムを整備し、国立衛研(戦略ソフト)の中野達也博士らが、ABINIT-MPを基盤としたシステムを整備し、それぞれ実用に供している。さらに、実際上、計算を行うためには、(3) できるだけ優れたGraphical User Interface環境の構築、が望まれる。

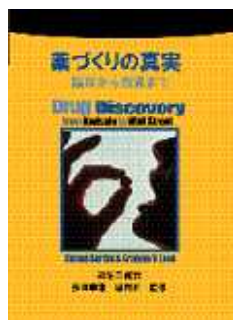
今回の講習では、実際にGAMESS/FMOや GUI 開発に関わっている主要メンバーが講師となって計算環境を説明するという、大変、貴重な機会であった。そのため、つくば市での朝からの開催であったにもかかわらず、募集を

プログラム

- 9:30-10:30 (D. Fedorov) FMO 法の概念と方法開発
応用と計算法の関係、又は精度と基底及び波動関数の影響
- 10:30-11:30 (北浦和夫) FMO 法の適用
応用可過程・現象とその例
- 11:30-12:00 (北浦和夫) 方法と応用に関する質疑応答
(D. Fedorov) network の設定と可搬計算機の準備
- 12:00-13:00 昼食
- 13:00-15:00 (末永正彦) Facio
Facio でのモデリング (一時間)
crambin の PDB を Internet から載せて
GAMESS 入力まで処理 (半時間)
質疑応答 (半時間)
- 15:00-15:30 (D. Fedorov) crambin の実行
- 15:30-16:00 休憩
- 16:00-17:30 (D. Fedorov) GAMESS
酒精と水の学習例
crambin の結果の解析と可視化
並列化計算の特徴 (GDDI)
秘術 (収束困難等)
- 17:30-18:00 全体応答



絶賛発売中



薬づくりの真実
臨床から投資まで

神沼二真 訳
多田幸雄 堀内正 監修

原書: Tamas Bartfai & Graham V. Lees, Drug Discovery from Bedside to Wall Street, Elsevier Academic Press, 2006

開始してすぐに予定した参加者数を越してしまい、応募者の多くをお断りしなければならない事態となった。ちなみに、応募者、約50名のうちわけは、民間企業が半数、大学30%、残りが国の研究機関となっていた。かなり遠方の参加者や応募者も少なくなかった。このことは、こうした手法に多くの研究者が関心を持っていることを示すものであり、CBI学会として、普及に向けたさらなる努力を今後も続ける意義を見出せたワークショップであった。

準備した関係者によれば、会場では、まずFedorov先生からFMO理論の概要、開発の経緯と今後公開予定の拡張、周辺ツールの紹介があり、さらにフラグメントの切り方、波動関数の選択、基底関数の選択や計算時間の目安など、実際に使用するにあたって役立つ情報を教えていただいた。続いて北浦先生から、タンパク質—リガンド相互作用の解析を目的として使用する場合に注意すべき点について、やはり具体的な説明がなされた。量子化学計算を精度良く行うためには、(量子化学のレベルで)きちんとした構造を得ることが重要である。このために必要な結晶の解像度や水素付加の方法、構造最適化の手法、相互作用様式によって選択すべき波動関数が異なること、水和状態で計算することの重要性などについて、理由を交えた解説をいただいた。

て、理由を交えた解説をいただいた。

実習準備と昼食の後は、FMOのGUIとして用いる事ができるFacioの開発者である九州大学の末永先生のご指導の下、その設定や基本的な操作方法を実習し、さらにクランピンを例に、実際にFMOの入力ファイルを作成する作業を行った。その後、産総研のクラスターマシンをお借りしてクランピンの計算を実行、40分程かかる計算の間には、Fedorov先生からFMOで採用されている2段階並列化の説明やその設定のTips、出力の見方、計算がうまくいかなかった場合の対処方法などについての詳しい説明があった。最後にクランピンの計算結果を読み込んでPIEDAで残基間相互作用エネルギーを解析し、実習の終了となった。

一日をかけたワークショップであったが、非常に具体的な解説と密度の濃い実習のためか、あっという間に終わってしまったように感じられた。これだけの内容をスムーズに進行できたのは、北浦先生やFedorov先生、末永先生はもちろん、スタッフとしてご協力いただいた産総研の方々の事前の準備が行き届いていたおかげであると思われる。改めて感謝の意を表したい。

情報計算化学生物学会 (CBI学会) 事務局

今後の研究講演会予定

◇第287回CBI学会研究講演会(2008年7月14日)

「臨床における薬物間相互作用の予測のための方法論;代謝酵素、トランスポーター」

世話人: 杉山雄一(東京大学)、前田和哉(東京大学)

◇第288回CBI学会研究講演会(2008年8月22日)

「バイオインフォマティクスの最近の話題:

次世代シーケンサーデータ解析とプロテオミクスによるバイオマーカー探索」(仮題)

世話人: 中井謙太(東大医科研)、河合隆利(エーザイ株式会社)

◇第289回チュートリアル講演会(2008年8月25日) (予定)

世話人: 飯島洋(日本大学)

8月 RNA研究の進歩と創薬へのインパクト

10月6日 半経験的分子軌道法(仮題) Stewart博士(Seiler研究所)、他

世話人: 平山令明(東海大学)

.....
CBI学会では、研究講演会の参加者に製品のカatalogを配布するサービスを(3種まで)2万円で承っております。希望される場合は、講演会の5日ほど前までに、事務局 cbi-staff@cbi.or.jp にご連絡下さい。

.....
なお、法人会員企業につきましてはこのサービスを無料でいたしております。参加者数とCatalog送付先を事務局までお問い合わせ下さい。
.....

投稿論文募集中！

Chem-Bio Informatics Journal に投稿すると：

論文投稿から公開まで最短1ヵ月半！

当学会ホームページとJ-stage「科学技術情報発信・流通総合システム」の双方で論文公開
論文公開後はChemPort, PubMed, CrossRef等を通して海外の様々な論文と相互リンク可能
Chemical Abstracts Service (CAS) で論文要旨収集される
Google Scholar でも論文検索される

この機会に是非本誌への投稿をご検討ください。

CBI ジャーナル刊行委員会

E-mail: editor@cbi.or.jp

http://www.cbi.or.jp/

< CBI学会 2008年大会 >

CBI学会 2008年大会広告・企業展示 スポンサー募集

テーマ：「疾病の経路網と創薬

—とくに核内受容体とメタボリック症候群および関連疾患に焦点を当てて」

< 1 > 企業展示

期間：10月22日（水）～24日（金）（3日間）会場学術総合センター中会議場（4室一体利用）

* 同会場にてポスター発表開催、その外の廊下も使用可能

設備：長机(180cm×60cm)をパネル(90cm×210cm)で囲むブース、椅子1脚

費用：30万円、募集数：25ブース

* 予稿集への広告を含みます。

* 電子機器の使用に若干の制限があります。（設置機器の規模、消費電力等）

< 2 > 予稿集への広告掲載（掲載ページサイズ・印刷費用）

① 本文内広告ページ(後付)※A4版/白黒2ページ(両面1枚)5万円

② 裏表紙A4版/カラー10万円

③ 表紙見返しA4版/カラー8万円

④ 裏表紙見返しA4版/カラー8万円

①～④ 入稿形式：版下フィルム、またはPDF、イラストレーター等の電子ファイル

※カラーページ、増ページに関しましては事務局までご相談ください

< 3 > 寄付・賛助金

一口5万円

***** お申込みは電子メールにて事務局までご連絡下さい *****

Eメール：cbi-staff@cbi.or.jp

詳しい内容につきましてはCBI学会ホームページをご覧ください。

次回研究講演会のお知らせ

第286回 CBI 学会研究講演会

「実践的パスウェイ解析 - 標的探索・メカニズム・安全性研究への応用」

Pathway/Network to Disease and Drug Discovery

開催趣旨: ゲノミクスやプロテオミクス、メタボロミクスなどのオミックスデータの蓄積により、膨大な分子間相互作用情報や相関関係情報もたらされた。これらの膨大な情報知識からPathologicな情報を抽出し、予測を行うことで、多くの相互作用やシグナルパスウェイの情報を推定することができる。これら膨大な分子間情報をデータベースとして体系的に整理し、病態の理解や毒性予測、標的探索などへ活用することが、創薬における研究の潮流の一つとなっている。その方策の一つとして、オミックスデータに対しパスウェイ・ネットワーク情報を利用して医学・生物学的な解釈を行う「パスウェイ解析」が存在する。しかし、パスウェイ解析には定石が無く、解析者個々の環境や工夫に依存するところが大きい。ゆえに今回は、創薬の最前線である製薬企業や、公的研究機関、IT企業などから、それぞれの現場に応じて実践されているパスウェイ解析を、具体的な手順や使用ツールの紹介をもとに解説してもらうことで「実用的なパスウェイ解析とは何か」という問いに対して、議論を発展させる機会としたい。

日時: 2008年6月25日(水) 13:10-17:45

場所: 日本化学会 化学会館7Fホール

東京都千代田区神田駿河台1-5(JRお茶の水駅下車、徒歩4分)

世話人: 河合隆利(エーザイ株式会社)、勝山マリコ(富士通株式会社)

プログラム

1. 13:10-13:20 はじめに

2. 13:20-14:10

「抗がん剤のメカニズムの理解に向けたパスウェイ解析」

門脇正史(エーザイ株式会社)

3. 14:10-15:00

「パスウェイソフトを利用したマイクロアレイデータの解析」

中津則之(独立行政法人 医薬基盤研究所)

<休憩 15:00-15:20 >

4. 15:20-16:10

「クロスオミックスによる適用拡大と安全性研究」

土井健太郎(富士通株式会社)

5. 16:10-17:30

「病態ネットワーク解析と治療遺伝子探索研究」

田中利男(三重大学大学院医学系研究科)

「文献マイニングとソフトウェアによる治療遺伝子探索研究へのアプローチ」

大崎研(株式会社ワールドフュージョン)

6. 17:30-17:45 総合討論

講演会参加費: 法人賛助会員: 無料

個人会員(非営利): 無料

個人会員(一般企業): ¥5,000

ビジター(非営利): ¥1,000

ビジター(一般企業): ¥10,000

出席を希望される方は事前に必ず事務局セミナー受付 seminar@cbi-society.org に連絡してください。

連絡先: CBI学会事務局 セミナー受付 E-mail: seminar@cbi-society.org

〒158-0097 東京都世田谷区用賀4-3-16 イイダビル301

TEL:03-5491-5423 FAX:03-5491-5462 <http://www.cbi.or.jp/>