

# CBI学会2016年大会 スポンサー企業企画枠 みずほ情報総研企画 MIZUHO/BioStationセミナー2016

## ～In silico 創薬へのFMO法の適用～

MIZUHO/BioStationは、タンパク質などの大規模分子の量子化学計算を可能とするプログラムパッケージです。フラグメント分子軌道(FMO)法を用いることで、大規模分子の電子状態や分子間の相互作用の解析を行うことができます。

本パッケージは、計算エンジンMIZUHO/ABINIT-MPと専用可視化プログラムMIZUHO/BioStation Viewerから構成されており、FMO法による計算結果を可視化し、電子状態や相互作用を直感的に把握することが可能です。また、詳細かつ定量的な計算結果に基づき、リガンド化合物とタンパク質との相互作用を官能基単位で相互作用のタイプに応じて評価することができるため、創薬における分子設計に有用な知見を得ることができます。

今回、CBI学会2016年大会の場をお借りして、MIZUHO/BioStationについてご紹介するセミナーを開催いたします。本セミナーでは、BioStationの開発グループの研究者によりMIZUHO/BioStationの適用事例についてご紹介いただきます。また、弊社よりMIZUHO/BioStationの機能をご紹介するとともに、実際にMIZUHO/BioStationの操作を体験いただけるハンズオンも開催いたします。

大規模分子の電子状態計算や分子間の相互作用解析、FMO法やBioStationに興味のある初心者の方にも分かりやすい内容となっておりますので、ご多忙の折とは存じますが、この機会に是非ご参加下さい。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

### 【セミナーの内容】

1. タイトル 「MIZUHO/BioStationセミナー: In silico創薬へのFMO法の活用事例」
2. 日時 2016年10月27日 15:30～17:00
3. 場所 タワーホール船堀4F 402号室(東京都江戸川区船堀4-1-1)
4. 参加費 無料(別途、CBI学会2016年大会への参加申し込みが必要)
5. 参加申し込み 以下のURLより、参加お申し込みをお願いいたします。  
<http://www.mizuho-ir.co.jp/seminar/info/2015/biostation1029.html>

### 6. プログラム

- 15:30-16:00 「FMO創薬コンソーシアムにおけるMIZUHO/BioStationの適用事例」  
星薬科大学  
薬学部 薬品物理化学教室  
准教授 福澤 薫 様

#### 【概要】

FMO創薬コンソーシアムではスーパーコンピュータ「京」を用いて多くのFMO計算を行っているが、MIZUHO/BioStationを用いたPIEDA計算も重要な位置を占めている。本講演では、FMO創薬コンソーシアムの中でのMIZUHO/BioStationの適用事例について紹介する。

- 16:00-16:30 「MIZUHO/BioStationの機能紹介」  
みずほ情報総研株式会社 サイエンスソリューション部  
コンサルタント 加藤 幸一郎

#### 【概要】

当社で提供しているMIZUHO/BioStationの相互作用解析機能についてご紹介いたします。MIZUHO/BioStationの最大の特徴は、リガンド・タンパク質系などの大規模系に対して、分子間・フラグメント間の相互作用の詳細な解析を直感的に行える点です。相互作用解析の内容と解析時の操作方法について、実例を交えて説明いたします。

- 16:30-17:00 「MIZUHO/BioStation Viewerハンズオン」

#### 【概要】

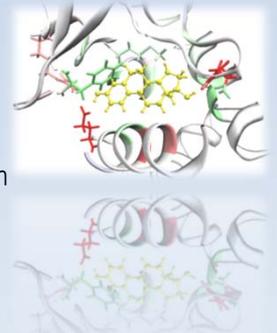
機能紹介にて説明した事例について、ノートPCを用いたハンズオンセミナーを開催いたします。ご自身のノートPC(Windowsのみ)にインストールしてご受講いただけるよう、セミナー終了後にもご使用いただける期間限定ライセンスを発行いたします。(※ノートPCのご準備が難しい方は、予めご連絡いただければ対応いたします。)

バイオ分子相互作用シミュレータ

MIZUHO/BioStation

MIZUHO/BioStationは、従来計算することが困難であったタンパク質などの大規模分子の電子状態計算や相互作用解析を可能にした量子化学計算プログラムパッケージです。

MIZUHO/BioStationは、計算エンジンMIZUHO/ABINIT-MPと専用可視化プログラムMIZUHO/BioStation Viewerから構成されており、フラグメント分子軌道(FMO)法に基づいて計算された電子状態計算結果から、リガンド化合物とタンパク質との相互作用を官能基単位で定量的に評価することができます。



本大会期間中、1F展示ホール2番ブースにてMIZUHO/BioStation及びcsDAIのパネル展示を実施しておりますので、ご来場の際は是非お立ち寄り下さい。

機能一覧

機能	概要
FMO法	FMO2法, FMO3法, FMO4法
エネルギー計算	HF法, MP2法, LMP2法, MP3法
エネルギー勾配	HF法, MP2法
基底関数	STO-3G,および6-31G基底系、モデルコアポテンシャル (MCP)
構造最適化	BFGS法, CG法, PRCG法, 部分構造最適化
population解析	Mulliken電荷, NBO電荷, ESP電荷
BSE補正	Counterpoise法
溶媒モデル	Poisson-Boltzmann方程式に基づいた連続溶媒モデル
解析機能	概要
IFIE解析	フラグメント間の相互作用エネルギーを定量的に解析
PIEDA解析	IFIEを4つのエネルギー成分(静電項、交換反発項、電荷移動項、分散項)に分解した解析
IFIE map	IFIEの2次元マップによる二体相互作用の網羅的解析
VISCANA	相互作用パターンの階層的クラスター解析によるリガンド類似性の抽出
CAFI	軌道レベルの電荷移動・分極相互作用解析
FILM	軌道レベルの分散相互作用解析(CH/ $\pi$ , $\pi$ / $\pi$ 相互作用等)
CHPI	CH/ $\pi$ 相互作用を解析・可視化
グリッドデータ解析	電子密度、静電ポテンシャル、分子軌道、電場ベクトル

Clinical sequencing data analysis integrator (csDAI)

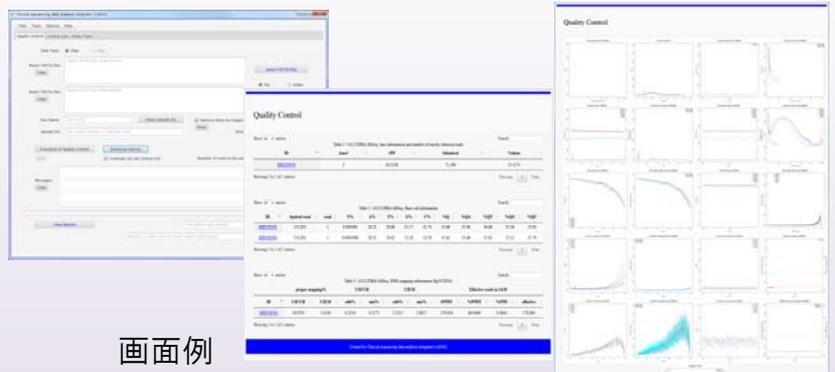
次世代シーケンサー(NGS)の急速な発展に伴い、このデータ処理が大きなボトルネックとなっています。NGSを実際の医療に応用する研究も活発に行われ始め、臨床検査では現場での迅速なデータ解析が求められています。

csDAIはMiSeq等の比較的小さなNGSデータの解析をWindows 7 PC上で解析するためのプラットフォームであり、多くのアカデミックフリーソフトウェア\*を組み合わせた最新の高精度なパイプラインを提供します。また、お客様のご要望により組み込みソフトウェアの変更、カスタマイズも可能です。

基本機能

1. Quality control解析
  - ・アダプター除去
  - ・不良タイル除去
  - ・Analysis ready read BAM作成
2. Germline call (GATK\*)
3. Somatic call (MuTect\*, Strelka)
4. アノテーション(ANNOVAR\*)

\*ライセンスは別途お客様が用意



画面例

※「BioStation」、「ABINIT-MP」は、国立大学法人 東京大学の登録商標であり、生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター(CISS)にて開発されています。  
 ※その他記載の製品、サービス名は各社の商標または登録商標です。