

## 第 26 回 FMO 研究会

### 「FMOで見る・精密化する分子のかたち」

日時：2022 年 3 月 8 日(火) 13:00-14:20

Zoom による開催

#### 開催趣旨：

近年の構造解析技術の発展に伴って、計算科学技術による構造精密化の重要性が高まっています。特にクライオ電子顕微鏡像からの精密な立体構造解析には大きな期待が寄せられています。本研究会では、単粒子構造解析における最先端の計算科学手法の創出に取り組んでおられる徳久先生から、最新の研究開発状況と FMO 法の活用についてお話しいただきます。また FMO 法の生みの親である北浦先生より、FMO 計算支援ソフト"fu"の最新の開発状況をご紹介頂けることになりました。多くの皆様のご参加をお待ちしています。

#### 1. 13:00-13:40

徳久淳師 (理化学研究所 計算科学研究センター(R-CCS))

「スーパーコンピュータ「富岳」を用いたテンプレートマッチング法による生体分子構造多形解析」



現在の私の研究テーマは、生体分子の "柔らかさ" を考慮した次世代創薬基盤の構築です。この新しい創薬基盤を開発することによって、合理的かつ効率的な新薬の創出に貢献したいと考えています。特に、単粒子構造解析 (SPA) 実験に着目し、「実験×AI×シミュレーション融合」により生体分子の構造多様性を解明する手法の開発を進めています。従来の SPA 実験では、多数の実験画像から主要な立体構造を構築します。一方、我々が開発を進めるテンプレートマッチング法では、データ同化の概念と AI 技術により、ノイズの多い一枚一枚の実験画像から高解像度で尤もらしい立体構造を推定します。本セミナーでは、スーパーコンピュータ「富岳」を用いた生体分子構造多形解析統合ワークフローの開発状況とそれを用いた個別応用への取り組みについて紹介します。

#### 2. 13:40-14:10

北浦和夫 (京都大学福井謙一記念研究センター)

「fu の開発状況について」



fu は、FMO 計算を支援する GUI ソフトウェアである。分子モデリング、FMO 計算入力データ作成と計算結果の可視化を容易に行う事を目的として開発している。2014 年に初版を sourceforge (プロジェクト名：“fu-suite”) で公開し、最新版は 2016 年 4 月に公開した fu-0.4.0 である。以降、非公開であるが (希望者にはいつでもソースコードを提供する)、最新開発版は fu-0.6.0 で、ここでは、従来使ってきた python2.7 から python3.6 に移行した。当日は、fu の機能を中心に開発状況を報告する。

参加申込み・お問合せ:

FMO 創薬コンソーシアム [fmodd.consortium@gmail.com](mailto:fmodd.consortium@gmail.com)

URL: <https://fmodd.jp/>