

10月25日（月）

Zoom ブレイクアウトルーム

<チュートリアル>

- TS-01** 第24回FMO研究会
FMOデータベースの最新機能紹介と実践チュートリアル-
COVID-19関連タンパク質の分子認識機構解析-
- TS-02** 半日で知る、化学分野のデータサイエンスおよび
人工知能概要：
「FS-08:化学データサイエンスおよび人工知能討論、
勉強会」立ち上げ会協賛

第24回 FMO 研究会
FMO データベースの最新機能紹介と実践チュートリアル
-COVID-19 関連タンパク質の分子認識機構解析-
24th FMO seminar
FMO Database tutorial

開催趣旨:

フラグメント分子軌道 (FMO) 計算結果を収載した FMO データベース (FMO DB; <https://drugdesign.riken.jp/FMODB/>) は、2019年2月の一般公開以来データ数を増やし、8月16日時点で 13230 構造を公開している。最近では新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) 特集ページを開設するなどの取り組みが広がっている。本セッションでは、FMO DB の概要を紹介するとともに、実際に FMO DB に登録されているデータを用いて、創薬研究に用いるための解析方法について紹介する。FMO DB の詳細を知りたい方、実際に FMO 計算結果を解析してみたい方のご参加をお待ちします。

モデレーター: 福澤 薫 Kaori Fukuzawa
星薬科大学 Hoshi University
高谷 大輔 Daisuke Takaya
理化学研究所 RIKEN BDR

~~~~~

**1. はじめに 13:00-13:05**

福澤 薫 Kaori Fukuzawa  
星薬科大学 Hoshi University

**2. FMO DB の最新の開発状況と機能の紹介 13:05-13:40**

高谷 大輔 Daisuke Takaya  
理化学研究所生命機能科学研究センター RIKEN BDR

量子化学計算の一つである FMO 法により得られる相互作用エネルギー (IFIE/PIEDA) はタンパク質-リガンド間相互作用解析及び創薬研究への応用が期待されている。私たちのグループでは FMO 計算データの蓄積を目的とした FMO DB を開発し、FMO DB コンソーシアムのメンバーによる計算、自動化前処理プロトコルで計算された結果等の FMO データを閲覧するための簡便なインターフェイスをホームページから提供している。本セッションでは FMO DB が提供する機能や最新の開発状況について紹介したい。

**休憩 13:40-13:50****3. <チュートリアル> FMO DB を活用したリガンド-タンパク質間相互作用解析 13:50-14:50**

半田 佑磨 Yuma Handa  
星薬科大学 Hoshi University

FMO DB に収載されている、タンパク質-リガンド複合体の登録データを用いた解析を行う。COVID-19 関連タンパク質である Main protease や、エストロゲン受容体 (ER)  $\beta$  複合体の計算結果を例に、FMO DB の web インターフェイスおよび FMO 専用 GUI の BioStation Viewer を使用した IFIE/PIEDA 解析の流れを解説し、リガンド結合性の評価や重要な相互作用の抽出について実践する。

**休憩 14:50-15:10****4. <チュートリアル> FMO DB を活用したタンパク質-タンパク質間相互作用解析 15:10-16:10**

渡邊 一樹 Kazuki Watanabe  
千葉大学 Chiba University

タンパク質-タンパク質間相互作用の例として、COVID-19 関連タンパク質である Spike タンパク質と抗体との結合性について、FMO DB の web インターフェイスおよび BioStation Viewer を用いた解析を実践する。さらに、FMO 計算による結合エネルギーと IC<sub>50</sub> との相関解析についても実施する。

休憩 16:10-16:20

**5. FMO DB の進捗と今後の課題 16:20-16:40**

**渡邊千鶴 Chiduru Watanabe**

理化学研究所生命機能科学研究センター, JST さきがけ RIKEN Center for Biosystems  
Dynamics Research, JST PRESTO

FMO DB データ蓄積において高分解能 X 線結晶構造データの収集や、GAMESS データの FMO DB 登録に向けた取り組みなどの進捗を紹介する。また、FMO 創薬コンソーシアムの活動の一環として、富岳を利用した MD スナップショットやドッキングデータ等の一連の大規模 FMO 計算のデータの登録が今後加速することが予測されるため、そのような大規模データの取り扱い等、今後の FMO DB の開発に向けた課題を紹介する。

**6. 総合質疑応答&個別相談 16:40-17:00**

~~~~~  
※ 事前の準備について

チュートリアルでの説明と並行して、実際に FMO DB、BioStation Viewer の操作を行っていただきます。希望者は FMO 創薬コンソーシアムのホームページから公開されている BioStation Viewer の事前インストールを行ってください。

なおチュートリアルで実際に使用する最新版の BioStation Viewer 等のプログラムやデータについては、チュートリアル開催の一週間前 (10/18)をめぐりに下記のサイトでご案内する予定です。

<https://drugdesign.riken.jp/pub/CBI2021tut/>

※ オリジナルエコバック配布について



希望者 (事前申し込み・先着 30 名様) に FMO DB・FMO DB ロゴ入りオリジナルエコバックを配布する予定です。

半日で知る、化学分野のデータサイエンスおよび人工知能概要：
「FS-08:化学データサイエンスおよび人工知能討論、勉強会」立ち上げ会協賛
A Half-day Overview of Data Science and Artificial Intelligence in the Field of Chemistry:
"FS-08: Chemical Data Science and Artificial Intelligence Discussion, Work Shop"
Kick-off Meeting Sponsorship

モデレーター： 湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta (株式会社インシリコデータ In Silico Data, Ltd)

化合物分野で最近頻繁に聞かれる言葉として、**薬物デザイン**、**仮想スクリーニング**、**ドラグリポジショニング**、**毒性予測/評価**、**機能性化合物デザイン**等の言葉(手法)がある。更には**動物実験代替法**研究分野での展開も急速に進行している。これらの手法はインシリコ(コンピューター)上で展開される研究である。これら手法の実施基本技術として**データサイエンス**や**人工知能**が展開されてきた。また、これらの基本技術はバイオや医療分野でも中核技術となる。関連で、DB、ネットワーク、クラウド等も関与してくる。

今後、5年、10年先まで同じ研究手法を継続できる保証はない。研究の大きな流れは、研究分野の異なる研究者との**分野間連携・融合**や**学際研究**となっている。このような将来の研究発展や変化に寄与できる可能性を有する**データサイエンス**や**人工知能**を武器と出来れば心強い。さらには、自分の研究に付加価値を付けることも可能となる。

◆参加していただきたい方々：データサイエンスや人工知能の素人の方、及び専門の方

1. WET研究者であるが、インシリコ関連技術を自分の研究に適用したい、あるいは興味を持っている研究者。従って、インシリコ関連技術に関しては初心者となる。
2. データサイエンスや人工知能の専門研究者であるが、アプリに関する知識が無い。即ち、化学分野の基礎知識が無く、化学分野への展開が出来ない意味での初心者。

◆今回のチュートリアル内容の基本方針：化学研究分野での適用技術中心の解説

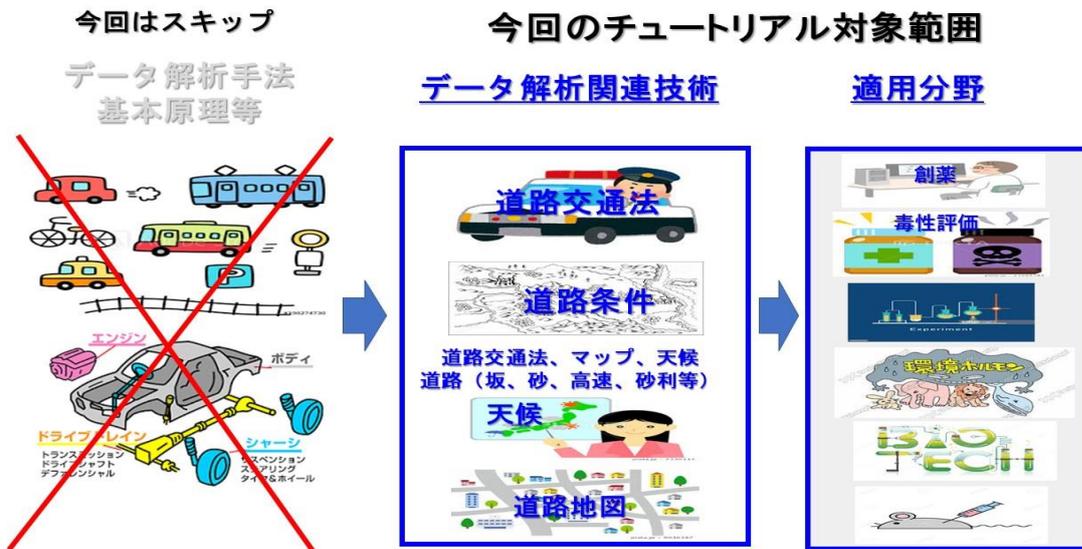
本チュートリアルは、研究を実施する観点で全体を俯瞰できるようにすることである。即ち、自分の研究にデータサイエンスや人工知能を適用する適用技術中心に説明する。

実際にデータサイエンスや人工知能を適用するのに必要な内容、即ち、①適用時の全体およびデータの流れ、②個々の手法の役割や適用限界、③化合物情報をコンピュータで扱うためのアナログ情報からデジタル情報への変換技術、④数値データの扱い方、⑤サンプル収集の留意点、⑥データ解析結果の評価法等の実施適用技術を中心に全体を説明する。

◆今回のチュートリアルの達成目標：

- ・化学分野のデータサイエンスや人工知能の全体概要を知る。
- ・WET及びDRY研究者間のコミュニケーションが取れて、共同研究を進められること。
- ・将来の研究の変化に追従できるように化学データサイエンスおよび人工知能を知る。

化学関連研究の達成を、車で移動することに例えたイメージ図



今回のチュートリアルでの討論内容概略

