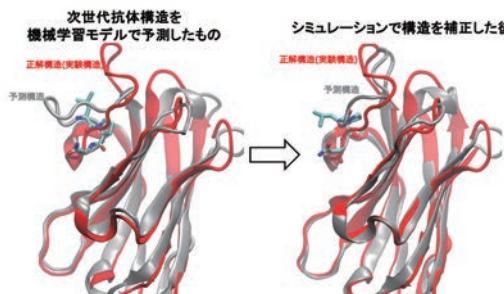


シミュレーションを用いて 実験計測が難しい生体分子構造や動態を調べる

様々な疾患も含めた多くの生命現象がタンパク質などの生体分子によって引き起こされており、生命現象の理解や疾患の根本的な治療にはミクロな領域での分子構造やダイナミクスを観察することが重要です。分子動力学シミュレーションは、原子解像度を持つ生体分子モデルを計算機の中に再構築し、物理法則によって分子を動かすことでミクロな振る舞いを「直接」観測することができる技術です。コンピュータの計算能力と相まって近年では計算顕微鏡と呼ばれるまでに発展し、実験を補完する手法として盛んに利用されています。ただし、創薬や材料開発へ貢献するには「計算時間がかかりすぎる」「モデル精度の限界」という二つの課題があります。1つ目の課題に対して、我々は効率的なアルゴリズムを導入することで、次世代抗体などのループ構造を短い時間で予測できるよう取り組んでいます。二つ目の課題に対して我々は、統計数理・機械学習による手法を導入して、実験データとシミュレーションを統合してより精度の高い観測を実現する手法開発に取り組んでいます。

次世代抗体（VHH）のループ構造のシミュレーションによる予測結果
(赤：正解構造、灰色：シミュレーション構造)



産業界へのアピールポイント

- 生体分子のシミュレーションにおいて、スペコンを用いた高度な計算から、複数の市販ソフトウェア、フルスクラッチ開発コードを用いて論文を出版した経験があります
- 創薬や材料開発において、実験結果を説明するための構造・物性情報が必要となる際にシミュレーションからそれをサポートすることができます
- 市販の分子モデリングソフトでは解決できない問題の相談に乗ります

実用化例・応用事例・活用例

- 次世代抗体（VHH）のループ構造予測のためのシミュレーション手法の開発と応用
- 次世代抗体（VHH）の変性温度予測
- 原子間力顕微鏡の画像データのみから探針形状を推定する手法開発と応用
- スペコンを駆使した生体分子シミュレーションによる構造や動態の解明



松永 康佑 (マツナガ ヤスヒロ) 准教授
大学院理工学研究科 数理電子情報部門 情報領域

【最近の研究テーマ】

- タンパク質言語モデルを用いた次世代交代（VHH）の物性予測
- 高速原子間力顕微鏡データの解析
- ウイルス外殻構造のモデリング

