

# 創薬のための タンパク質構造インフォマティクス2

長浜バイオ大学におけるBINDSユニット連携講習会

Web 会議システム  
Zoom による

オンライン  
講習会

2021. 9. 17 Fri

13:30~17:00  
(13:00より受付開始)

## 講師

「深層学習によるタンパク質立体構造の予測と品質評価」  
石田 貴士（東工大情報理工学院）

「フリーソフトウェアだけで行う簡単リガンドドッキング」  
塩生 真史（長浜バイオ大学フロンティアバイオサイエンス学科）

「計算によるタンパク質間相互作用予測と複合体構造予測」  
大上 雅史（東工大情報理工学院 / アヘッド・バイオコンピューティング）

## 世話人

白井 剛（BINDSプラットフォーム機能最適化ユニット）

参加費：無料  
事前登録：要

下記URLまたはQRコードからお申し込みください

<https://www.binds-registration.info/regi/49>

※ 当講習会へのご参加申し込みにつきましては、こちらのサイトからよろしくお願いします。

※ 折り返し、ZOOM URL などのご案内等をお送りいたします。

※ ご入力いただきました個人情報は、参加者への事務連絡、統計分析以外には使用いたしません。





## 概要

近年、抗体医薬品など生体分子を利用したバイオ医薬品の躍進により、タンパク質科学の創薬における重要性が高まっています。特にタンパク質の相互作用を理論的に予測する情報生物学的方法は、今後の創薬研究に必須の手法となることが期待されます。この講習会では創薬支援のためのタンパク質構造インフォマティクスをテーマとして、タンパク質の構造予測および相互作用予測の実践的方法を簡単な実習を交えて解説することを目的とします。

## プログラム

- 13:30 - 13:40 | **「AMED からのご案内・はじめに」**  
白井 剛（プラットフォーム機能最適化ユニット）
- 13:40 - 14:40 | **「深層学習によるタンパク質立体構造の予測と品質評価」**  
石田 貴士（東工大情報理工学院）  
近年、アミノ酸配列からのタンパク質立体構造予測は、深層学習などの機械学習技術の発達により大きな進展を遂げつつあります。機械学習の利用は2面角などの局所構造の予測に加え、従来は距離ベースのエネルギー関数が利用されていたモデル構造の品質評価など多岐に渡っており、それらを理解することでより高精度な予測が実現可能となっています。本講義ではタンパク質立体構造予測の基礎とその最新動向について説明し、現在 Web 上で利用可能なツールを組み合わせることで、より高精度な立体構造予測を実現する方法を簡単に解説します。
- 14:45 - 15:45 | **「フリーソフトウェアだけで行う簡単リガンドドッキング」**  
塩生 真史（長浜バイオ大学フロンティアバイオサイエンス学科）  
低分子リガンドドッキングは、構造を元にした創薬（SBDD）の際に行われるバーチャルスクリーニングの基礎となるだけでなく、タンパク質の分子機能の理解に重要な情報となるタンパク質 - 低分子化合物の複合体構造を予測できる技術です。既知のタンパク質立体構造において結合している低分子化合物を網羅的に収集しているウェブデータベースである Het-PDB Navi. からは、低分子リガンドドッキングの際に重要な情報となる、標的タンパク質における低分子化合物の結合部位を取得することができます。本講習会では、Het-PDB Navi. やフリーで利用できるソフトウェアを組み合わせることで、低分子リガンド - タンパク質ドッキングを実習形式で体験していただきます。
- 15:50 - 16:50 | **「計算によるタンパク質間相互作用予測と複合体構造予測」**  
大上 雅史（東工大情報理工学院 / アヘッド・バイオコンピューティング）  
本講義では、計算によって2つのタンパク質の間にタンパク質間相互作用が起きるかどうかを予測する技術（タンパク質間相互作用予測）と、タンパク質の複合体構造を予測する技術（タンパク質複合体構造予測）を扱います。これらの計算による予測では、機械学習や分子ドッキングシミュレーションが活用されています。それぞれの手法について原理や最新動向を解説するとともに、MEGADOCK をはじめとする現在活用可能なツールを紹介し、ハンズオンでの実習を行います。