

FMO計算法：入門から創薬への応用まで

ハンズオン講習会

『FOCUSスパコンでのFMO計算の実際』と『"たんぱく質-小分子リガンド"複合体のFMO計算のコツ』

フラグメント分子軌道法(FMO法)では、量子力学に基づいたタンパク質-リガンド間の相互作用エネルギーが求められるため、構造ベース創薬のための「古典力場では得られない重要な情報」が提供されます。

今回の講習会では、1日目に初心者向けにABINIT-MPとBioStation Viewerを用いたFMO計算の実際を体験します。2日目には「タンパク質-小分子リガンド」複合体におけるFMO計算に関して、つまずきやすい点を取り上げ解決策を解説します。両日とも講義と実習で学ぶ実践的な内容となっています。

なお実習では「FOCUSスパコン」を用いるため、FOCUSスパコンの概要に関する講義も含まれます。

日時

2018年 **8月9日(木)**、**8月10日(金)**

1日目: 10:00~17:00 (9:45 受付開始)

2日目: 10:00~17:00 (9:45 受付開始)

受講料

無料 (定員10名)

会場

公益財団法人計算科学振興財団 (FOCUS) 実習室
兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-28 計算科学センタービル
「京コンピュータ前駅」(ポートライナー)より徒歩約3分

対象者

主として次のような方を対象とします。

- 1) 「タンパク質-小分子リガンド」複合体のFMO計算に興味をお持ちの方
- 2) FMO法に興味はあるが、これまでほとんど経験のない方
- 3) ABINIT-MPとBioStation ViewerによるFMO計算に興味のある方
- 4) ABINIT-MPのインストール手順について知りたい方
- 5) FMO計算における基底の選び方や、計算がエラーで中途終了した際の対応に不安のある方
- 6) リガンドのフラグメント分割について詳しく知りたい方

内容

1日目午前: Linux mini講習会(初心者向; 参加は任意, Linuxのコマンドライン操作に不慣れな方を対象)

1日目午後: 「FMO法」の理論(入門編)、ABINIT-MPとBioStation Viewerを用いたFMO計算の実際(初心者向)、ABINIT-MPのインストール方法

2日目午前: FOCUSスパコンの概要、ABINIT-MPによるFMO計算の「ベンチマーク」と「FOCUSスパコンにおけるシステム・並列コア数の選択」

2日目午後: 「FMO法」の理論(中級編)、FMO計算のトラブルシューティング、手動フラグメント分割(中級者向)

申込方法

申し込みフォーム(http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/simulation_school/fmo201808/)からお申し込みください。部分的な参加も歓迎します。なお、「質問等」欄に専門分野(計算科学、創薬・合成化学、構造生物学、その他該当する分野全て)を明記してください。

先着順にて、事務局よりご連絡いたします。

なお、開催にあたって、参加者情報は講演者に提供されます。

【問い合わせ先】神戸大学計算科学教育センター事務局: fmo-contact@eccse.kobe-u.ac.jp

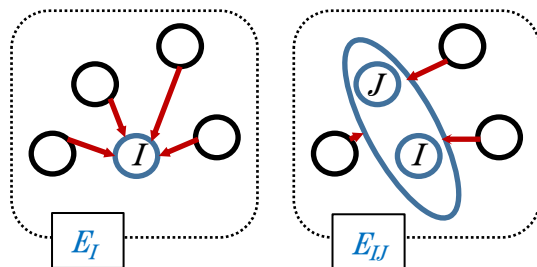
締切 : 2018年8月8日(水)

FMO講習会の感想



参加者A

この講習会ではFMO計算を行う際につまずきやすいポイントを抑え、解決策も教えてもらえるので、非常に分かりやすくFMO計算がスムーズに流せるようになりました！



$$E_{\text{FMO}} = \sum_I E_I + \sum_{I < J} (E_{IJ} - E_I - E_J)$$

主催: 神戸大学計算科学教育センター 共催: CBI学会FMO研究会

協賛: (公財) 計算科学振興財団 後援: (株)モルシス、(株)富士通九州システムズ