

# FMO講習会：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

2019年 **2月14日(木)**、**2月15日(金)**

1日目:10:00~17:00 (9:45 受付開始)

2日目:10:30~17:00 (10:15 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  
**遠隔での講義の視聴を受け付けます。**  
(遠隔受講では、実習のサポートを十分できないことをご理解ください)

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/fmo201902/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/simulation_school/fmo201902/))からお申し込みください。部分的な参加も歓迎します。遠隔での受講も可能です。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](mailto:fmo-contact@eccse.kobe-u.ac.jp)

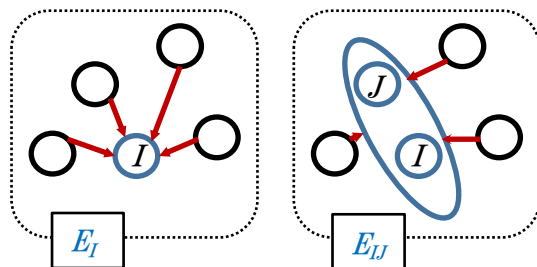
**締切 : 2019年2月13日(水)**

#### 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！



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