詳細：http://mddpm.riken.jp/research/research_software_library.html

創薬ビッグデータ統合システム

ゲノム医療・創薬に貢献する創薬ビッグデータ統合システムの完成を目指してポスト「京」重点課題1で開発した超大規模生体分子システムシミュレーション、長時間分子シミュレーション技術を紹介

		複合体マルチコンフォーメーション解析	結合自由エネルギー計算	選択性予測、複数タンパク質との結合評価	化学構造変換手法 De novo, FBDD	バーチャルスクリーニング、ドッキング計算	APOマルチコンフォーメーション生成、タンパク質間ネットワーク推定	化合物生成手法 De novo, FBDD	システム構築、組合せ最適化アルゴリズム
GENESIS	タンパク質、膜、核酸、糖鎖など、生体内分子系のための分子動力学ソフトウェア	○	○				○		
generalized Replica-Exchange with Solute Tempering (gREST)	生体分子系の一部の温度を向上させることでサンプリング効率を向上させる	○					○		
generalized Replica-Exchange with Solute Tempering combined with a flat-bottom restraint	gREST法によってリガンドのサンプリングを加速し、リガンド結合ポーズを予測する						○		
generalized Replica-Exchange with Solute Tempering combined with Replica-Exchange Umbrella Sampling (gREST/REUS)	gREST法とREUS法を組合せることでリガンド-タンパク質結合のサンプリング効率を向上させる						○		
Gaussian accelerated Replica-Exchange Umbrella Sampling (GaREUS)	Gaussian accelerated Molecular Dynamics (GaMD)法とREUS法を組合せることで生体分子の構造サンプリングの効率を向上させる						○		
Free Energy Perturbation (FEP)	標的タンパク質とリガンドの結合親和性を精密に計算する		○						
ColDock	タンパク質と低分子の複合体立体構造を全原子モデルで高速に予測する	○							
dPaCS-MDMSM	タンパク質複合体の解離シミュレーションによってタンパク質複合体の結合エネルギー・解離速度定数・結合速度定数を計算	○					○		
evERdock	タンパク質ータンパク質ドッキングによって生成した大量のデコイから全原子モデルを使った高速計算で結合自由エネルギーを評価することによって尤もらしいものを選択する						○		
SCUBA	全原子モデル計算により核酸やタンパク質などの生体高分子を対象にした分子動力学シミュレーションを実行する						○		
CafeMol	生体分子の粗視化分子動力学シミュレーション						○		
QM/MM RWFE-SCF 法	非経験的量子化学計算と長時間分子動力学シミュレーションを組み合わせた確率的最適化手法により、機能活性部位の電子状態と分子構造を精度よく決定する	○							
Naive Bayes Classifier	ペプチド・タンパク質の構造をナイーブベイズ分類器によって、構造変化を検知する						○		
DirectionalStatistics	ペプチド・タンパク質の2面角群に対して、周期性を考慮した平均・分散を算出する						○		
WaterHall	MDシミュレーションで得られる構造ファイル群に対して、計算位相幾何学的にタンパク質周囲の水分子分布を特徴付ける	○					○		
MP-CAFEE (Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy with well-Equilibrated states)	標的タンパク質と低分子量有機化合物の結合親和性（結合自由エネルギー）を大規模分子動力学シミュレーションによって精密に計算する		○						
FUJI force field	高精度タンパク質力場	○	○				○		
TSMD（Tree Search Molecular Dynamics Simulation）	タンパク質のフォールディングの過程を、高速にシミュレーションすることができる						○		
BPBI（Binding pose prediction by best arm identification）	MM-PBSAを用いた自由エネルギー計算の際、初期ドッキングポーズを機械学習で適切に選択することで、高速化する	○							
ChemTS	所望の特性を持つ化合物を、深層学習とシミュレーションを組み合わせて設計する				○			○	
COMBO（COMmon Bayesian Optimization）	ベイズ最適化を用いた実験計画								○
心毒性予測システム	薬剤が不整脈を誘発するリスクを予測するために心筋イオンチャネルに対する薬剤の親和性を予測する			○					
Virtual Ligand (VL) method	仮想リガンドによりタンパク質ポケット空間を膨張させた後、化合物ドッキング・MD/MM-PBSA法により医薬品化合物の結合ポーズを予測する	○							
Parallel-rDock	スパコンを用いてタンパク質-化合物ドッキング計算を高速に実行する					○			
FP-rDock	タンパク質柔軟性を考慮したタンパク質-化合物ドッキング計算を実行する					○			