

分子動力学計算 特徴自動抽出サポート

膨大な原子数が含まれる Gromacs、Amber など計算されたトラジェクトリの中から、状態変化を説明する具体的な部位をランク付けして出力するプログラムの提供とサポートを行うサービスです。

本サービスは、2017 年から 3 年間ライフインテリジェンスコンソーシアム (LINC) において開発された技術が基になっています。

解析例 RET kinase 野生体・変異体の長時間 MD 計算の比較

第一線の研究者が経験に基づき時間を掛けて見つけ出した部位と [T. Nakaoku et al., Nat. Commun. 9, 625 (2018).], 第一線の研究者でも気付かなかった重要な部位の両方を自動で見つけることができました。

決定木を用いて自動抽出された部位



研究者でも気付かなかった重要な部位 (Gly736)

研究者が時間を掛けて見つけ出した部位 (Glu734)

紫：野生体
青：S904F変異体

この解析例の作成においてはLINC参加製薬会社様にご協力頂きました。

サービス内容

- ・プログラム本体の提供、利用方法の案内
- ・プログラムのカスタマイズ
- ・お手持ちのトラジェクトリファイルの解析など

価格：100万円～

ご必要なサービスのボリュームに応じて都度見積もり

導入
実績

理化学研究所 京都大学 横浜市立大学 製薬企業数社