



第 9 回ワークショップ 開催報告

森田 明弘 (東北大院理・A01 班計画研究代表者)

第 9 回ワークショップ「柔らかな系を扱う自由エネルギー計算手法」が、平成 27 年 3 月 16 日 (月)、17 日 (火) に、東北大学理学研究科 (青葉山キャンパス) で開催されました。参加者は 30 名あまりで、本領域外の方の飛び入り参加もありました。

柔軟かで自由度の大きな系を理解するために、自由エネルギーの計算は理論面では分野を超えた共通の関心事です。本領域で自由エネルギー計算に関心をもつ研究者がその計算手法や原理、アルゴリズムなどについて理解を深め合うことを目的として企画されました。3 名の講師を招待して 3 時間の講演時間をとっていただき、研究成果よりも普段の学会などで伺えないような計算手法の詳細に重点をおいたマニアックな研究会を行いました。

1 日目には森下徹也先生 (産総研) が「LogMFD によるレア・イベントサンプリングと自由エネルギー計算」という題で講演されました。自由エネルギー面の計算手法のなかで平均力ダイナミクスと呼ばれる一連の手法があり、その全貌を見通しよく説明された後で、その一つとして森下先生自身が開発された LogMFD 法のアルゴリズムと特長を解説されました。自由エネルギー障壁を超えるサンプリングを効率化でき、しかも局所のサンプリングから on-the-fly で自由エネルギーを求めることが可能となったことが分かりました。

2 日目午前には藤崎弘士先生 (日本医大) が「生体分子における反応経路とキネティックスの計算手法」と題して、自由エネルギー面上の反応経路の最適化サンプリング手法全般の解説と、その中でもとくに string 法と呼ばれる方法の発展を詳しく解説されました。さらに求められた自由エネルギー面上の経路をもとに反応速度への展開を紹介されました。溶液内反応速度論の歴史をふまえて、近年生体分子の反応速度論への応用を目指して発達してきたマルコフ状態モデルやマイルストーンの理論などを解説されました。

2 日目午後には山下雄史先生 (東大先端研) が「創薬科学における結合自由エネルギー予測法の展開」について、分子科学計算による創薬への応用の現状と可能性について講演されました。創薬においては標的タンパク質と薬との結合自由エネルギーの信頼できる理

論計算が渴望されており、分子動力学計算による高精度予測の基礎理論から今後の応用までご自身の研究をふまえた具体的な議論が展開されました。

またこれら 3 名の講演に加えて、1 日目の午後には各 30 分の講演を 4 名の方が行いました。山守優氏 (東大分生研) は「マルチスケールサンプリング手法 MuSTAR MD を用いた自由エネルギー解析」、高橋英明氏 (東北大理) は「QM/MM-ER 法による電子密度揺らぎの自由エネルギー解析」、林重彦氏 (京大理) は「QM/MM 自由エネルギー構造最適化法の理論と思想」、森俊文氏 (分子研) は「効率的な自由エネルギー計算と構造サンプリングに向けた integrated Hamiltonian sampling 法の開発」と題した研究紹介を行いました。それぞれの研究のなかで現れる自由エネルギー計算についての工夫を発表し、領域内でのお互いの理解を深めました。

今回のワークショップでは 3 時間の講演という新しい試みで、長丁場が大丈夫なのか実行委員でも不確定などころがありました。しかし、講師の先生がよく準備してくださったおかげで、詳しいところまで聴衆に伝わり、どの講演も途中から参加者によって、普段の研究会では見られないほどの活発な議論がおこりました。その議論に支えられて 3 時間が短く感じられ、参加者として想定以上に満足感のある研究会でした。自由エネルギー計算は、多少分野の異なる研究者の間でも基本概念を共有できるテーマで、詳細に踏み込んでも参加者の間にかみ合った議論が成立するのは、私からみても印象的でした。講師の先生および参加者の方にこの場を借りて感謝申し上げます。今後もこのような取り組みを続けられると実り多いと思います。



第 9 回ワークショップ参加者 (東北大青葉山キャンパス、小川正孝先生の銅像前にて)。