



課題名：
生体分子シミュレータを基にした大規模推論システムの開発と応用

松永 康佑（埼玉大学・
情報メディア基盤センター・
准教授）

概要・目標

- ◆ 生体分子シミュレータを活用して、実験データから逆問題を解き、分子構造やダイナミクスに関する大規模な統計的推論を実現する。具体的には、GENESISなどのシミュレータをベイズ推論・機械学習/AIと組み合わせて構造空間の探索範囲をうまく絞り込むことで、これまで不可能であった高次元サンプリングを実現し生命科学の新たな知見を得る。

実施体制・関係機関・研究内容

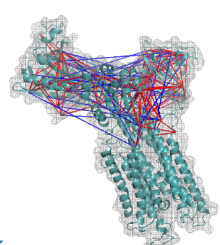
- ◆ 静的な構造アンサンブルから時間情報を含んだ構造ダイナミクスまでを連続的にサブ課題として設定して取り組む

複合体構造の推論

サブ課題4 (森 東理大)

エラー・ノイズを含む実験データからの統合的立体構造推論

手動モデリング



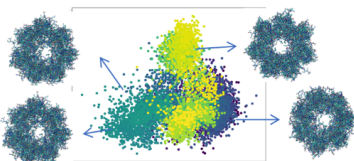
高精度立体構造

自動モデリング

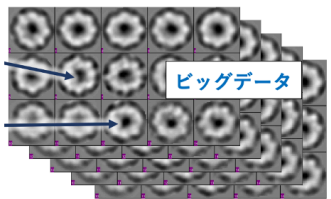
構造アンサンブルの推論

サブ課題3 (Tama 名大)

クライオ電顕データからの構造アンサンブル推論



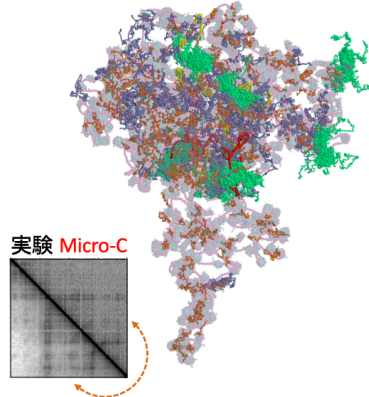
データに基づく構造多形情報



構造ダイナミクスの推論

サブ課題2 (高田 京大)

遺伝子発現と共役するゲノム3次元構造動態の推論

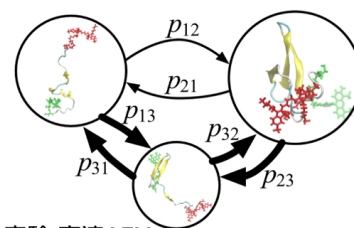


実験 Micro-C

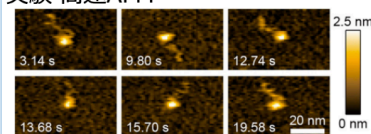
構造ダイナミクスの推論

サブ課題1 (松永 埼玉大)

マルコフ状態モデルを介した構造ダイナミクスの推論



実験 高速AFM



Kodera and Ando, *Methods* (2022)

- ◆ 共通基盤
小林 (理研)らがGENESISの高度化に協力

- ◆ 分野横断
機械学習/AIモデル開発に中村 (明治大)らが協力

- ◆ 連携体制
ターゲットとなる計測データの実験研究者と連携

想定される具体的成果

- ◆ 平均化されたもしくはノイズの大きな計測データから、これまで不可能だった分子構造アンサンブル・ダイナミクス情報を推定し、新たな生命科学的知見を得る。推定された構造アンサンブル・ダイナミクス情報は他の計測データまたは同じデータの一部を用いて交差検証する。