

水素・重水素交換質量分析(HDX-MS)データに基づくタンパク質複合体構造予測

HDXRankは、様々なドッキングツールやAlphaFold3などが生成した複数の予測候補の中から、HDX-MS実験データと最も整合性の高い「正解に近い構造」を、グラフニューラルネットワークによって計算されたスコアによって優先順位付けする。従来のドッキングスコア単体よりも高い精度で、ネイティブ(自然な)状態に近い結合ポーズを識別できることが示された。創薬研究などに貢献が期待される。

Wang et al., Journal of Chemical Theory and Computation, 2025

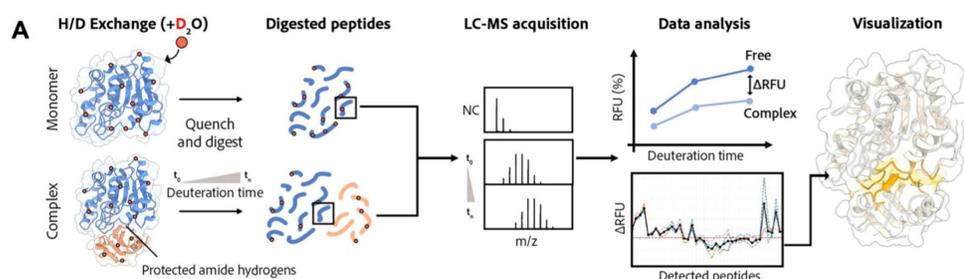


図: HDXRANKの概要

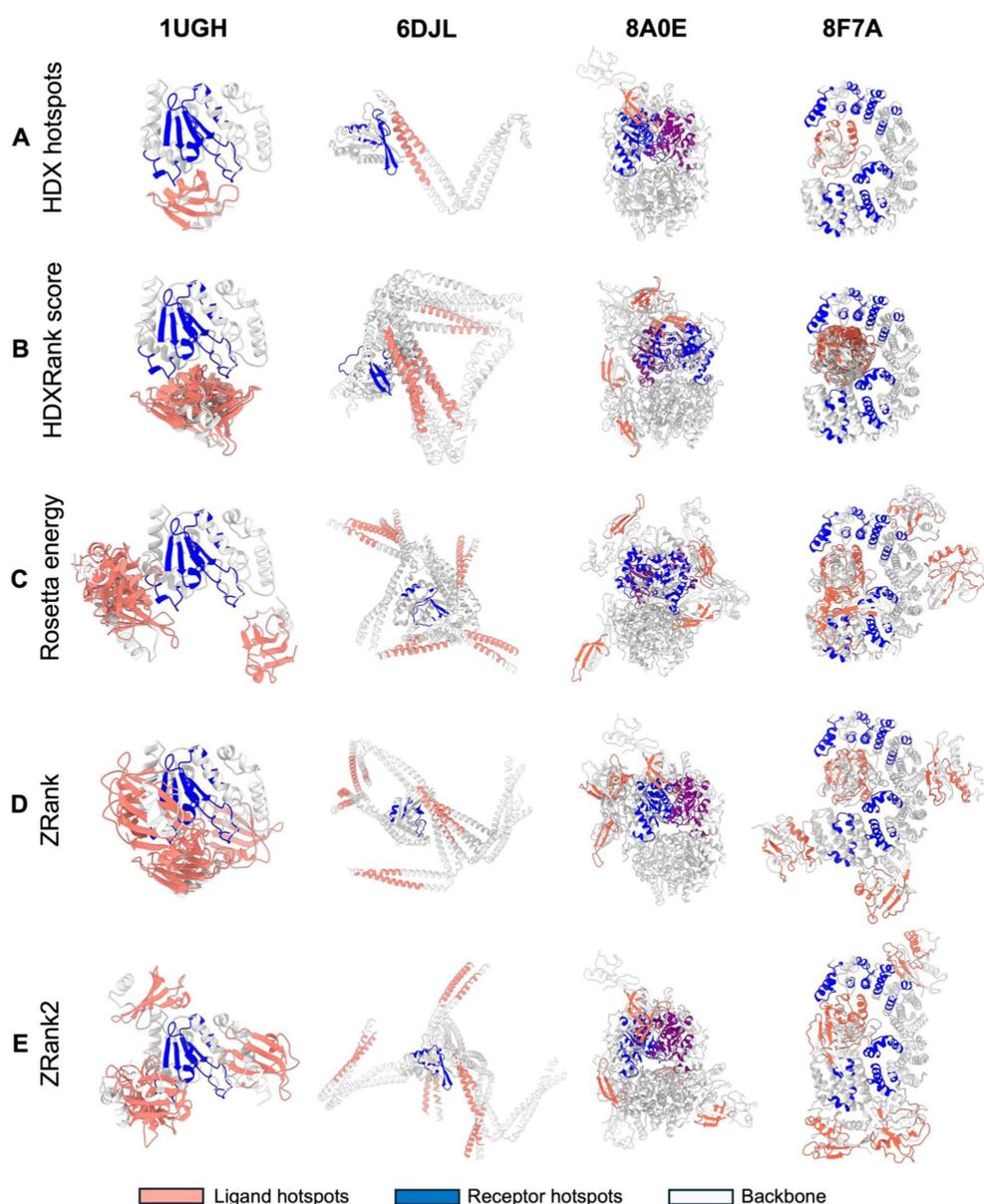


図: HDXRANKと他手法の比較

CRYSIM: イジングマシンを用いた大規模な結晶構造予測

CRYSIMは、GPUベースのイジングマシン(組み合わせ最適化問題に特化した計算機)を活用した、新しい結晶構造予測(CSP)アルゴリズムである。空間群やワイクフ位置、独立な原子サイトの座標を個別の変数として符号化することで、探索空間を削減し、物理的に妥当な対称性を持つ構造を優先的に見つけることができる。現在はGPUを用いているが、将来的に量子アニーリングマシンが大規模化・高度化した際にも対応可能な設計となっている。

Liang et al., Communications Physics, 2025.

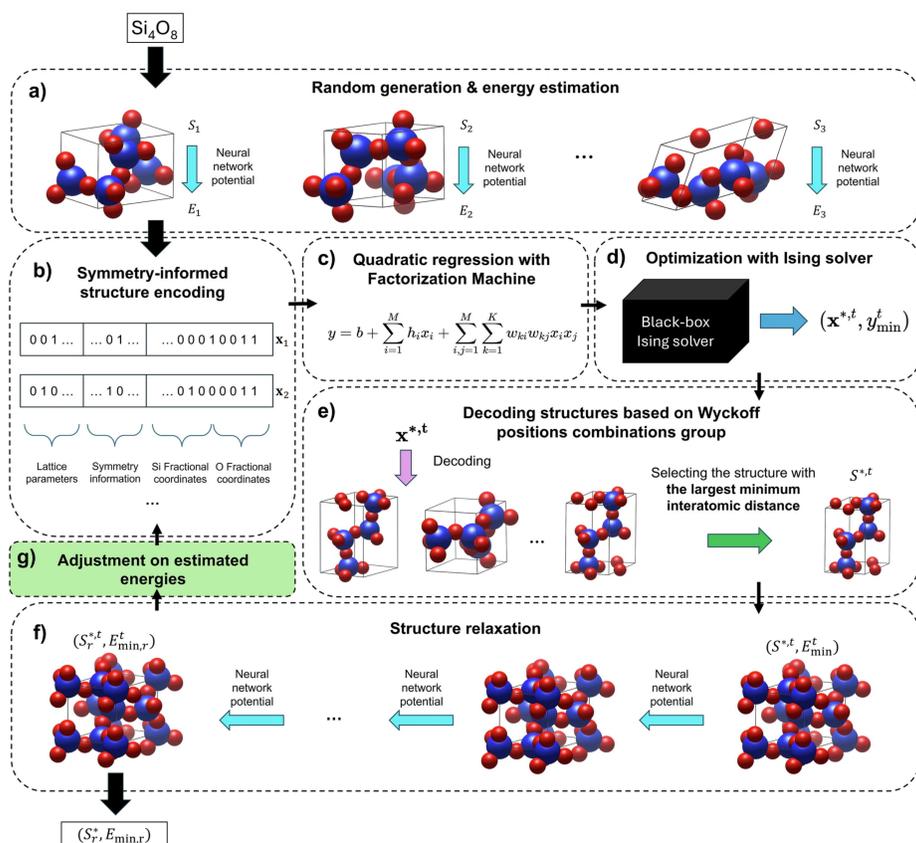


図: CRYSIMの計算フロー

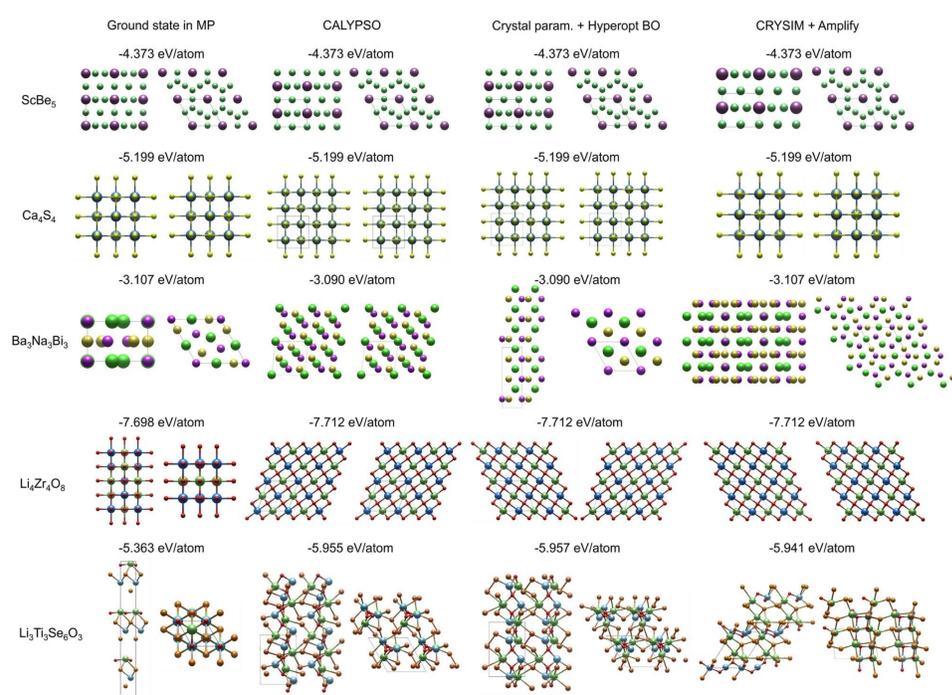


図: CRYSIMと他手法の比較