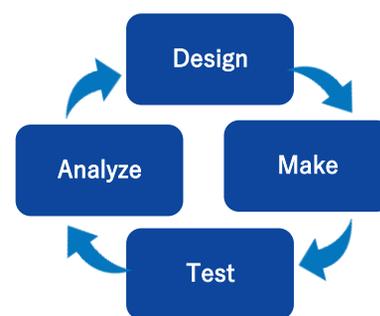


P-FEP: Relative Binding Free Energy Perturbation (RBFEP) 受託計算サービス

Preferred Networks (PFN)が開発したRelative Binding Free Energy Perturbation (RBFEP)計算を、弊社GPUクラスターで実行する受託計算サービス(サービス名: P-FEP)として提供します。

P-FEPは、タンパク質立体構造に基づく低分子化合物を対象とした創薬研究におけるヒット化合物探索からリード化合物最適化過程でその威力を発揮します。これまで実験に頼っていた創薬DMTAサイクルに、高精度な活性予測を提供する *in silico*手法であるP-FEPを組み入れることで、創薬研究の効率向上を支援します。



創薬DMTAサイクル

サービス概要

- 貴社の低分子化合物を対象とした創薬研究におけるヒット探索からリード化合物最適化過程を *in silico* 手法で支援します
- ケミストが設計したりガンド化合物がタンパク質に結合した立体構造を使用し、結合活性値を高精度に予測します
- 実験で得られた十個程度のヒット化合物の活性値を再現出来る様に計算条件の最適化を実施後、貴社で設計された数百個規模の化合物の活性値を予測します
- PFNが所有する計算リソースを活用するため、貴社で計算環境をご用意いただく必要がありません
- 経験豊富なPFN研究者がP-FEPを実施するため、貴社での準備期間が不要で短期間で予測計算結果を得ることが可能です
- 貴社内に計算化学の専門家がいらっしゃらない場合も、PFN計算化学研究者がサポートいたしますのでP-FEPをプロジェクトで活用することが可能です
- 化合物の結合構造が未知の場合や、P-FEPによる活性予測以外の解析も経験豊富なPFN研究者が対応可能です。是非、ご相談ください

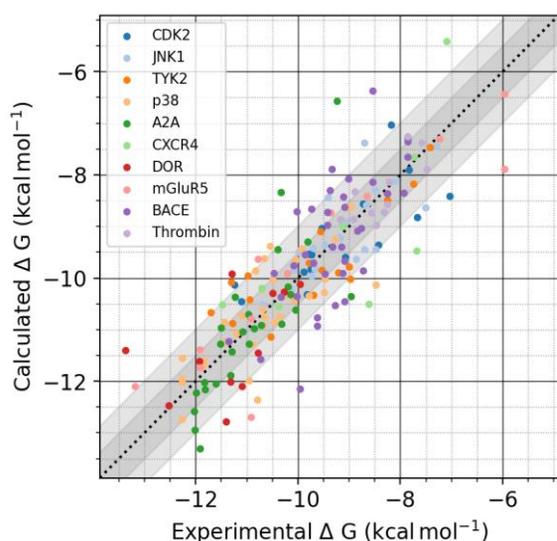


図1. 既知FEP用ベンチマークセットを使用したP-FEPの計算予測精度
J. Am. Chem. Soc. **2015**, *137*, 2695
J. Chem. Inf. Model. **2020**, *60*, 5457
ChemRxiv. **2023**.
doi: 10.26434/chemrxiv-2023-mhp2x

P-FEPとは

- 既報の研究成果を基にPFNの研究者が独自に開発した結合自由エネルギー(ΔG_{bind})を高精度に予測するサービス
- すべての計算を弊社が保有するセキュアな大規模GPUクラスター上で実行するため、多量の化合物の活性予測も短期間で実現可能
- REST2、Off-site charge等の最先端技術を実装
- P-FEPの予測精度は、膜タンパク質を含む一般的に使用されているベンチマークセットに対して実施した場合、図1に示す通り高い予測精度を実現
- 計算に使用する力場を変更するなど、計算条件を柔軟に変更することが可能
- ENEOS(株)と共同開発したNeural Network Potential (PNP; Preferred Potential)を用いて改良した低分子化合物用力場パラメーターを使用可能

技術情報

<https://tech.preferred.jp/tag/drug-discovery/>

