

課題名(タイトル):

計算機による結合自由エネルギー評価手法の研究

利用者氏名:

小松輝久

理研における所属研究室名:

生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

タンパク質などの生体高分子の機能は、細胞の代謝や恒常性の維持、集団としての同期、分化といった様々な過程を形作る基礎となっている。これらの機能を低分子薬剤によって阻害することなどを通じた機能の制御を目指し、目的に応じた有益な低分子のデザインを計算機シミュレーションによって探索することが求められている。このためには、結合自由エネルギーの評価手法を開発し、信頼性等の評価を積み重ねていく地道な研究が必要である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

前項の目的に向けて、低分子とタンパク質の混合系の計算機シミュレーションを行う環境を構築した。GROMACS 2016-3 をベースとして、コードの改変を行い、デバッグ等を行った。

3. 結果

分子動力学計算において、計算コストが高い長距離クーロン力の計算部分を、より低コストの計算で置き換えるための手法開発、検証のための基本となるコードの改変を行った。

4. まとめ

タンパク質構造のような、非常に大きな自由度を持つ系に対して、十分に信頼に足る自由エネルギー評価手法を確立することは、原子分子というミクロスケールから生体系を研究するうえで、必要

且つ重要なステップである。本課題は、大規模計算によって、計算手法の妥当性評価、確立を目指すものである。

5. 今後の計画・展望

新規導入された BWMPC のマルチコアを有効に用いるため、ハイブリッド並列でのシミュレーションを行う。