

課題名(タイトル):

長時間分子動力学シミュレーションのデータ解析プログラムの開発と応用

利用者氏名: 小山 洋平

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

近年、並列計算機や GPU を用いたタンパク質などの生体分子シミュレーションではマイクロ秒オーダーのシミュレーションが可能になってきている。また、報告者の所属研究室では分子動力学専用計算機 MDGRAPE-4A が開発され、10万原子系で一日に約1マイクロ秒のシミュレーションを実行することが可能である。マイクロ秒オーダーでは平均構造付近の構造ゆらぎだけではなく、アミノ酸の主鎖や側鎖の二面角変化などのより複雑な構造変化が生じるため、タンパク質機能の理解のためには、このような複雑な構造変化をデータ解析により明らかにすることが必要になる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

3. 結果

アミノ酸の変異により構造変化が生じると考えられているタンパク質について、野生型および変異体、タンパク質単独および複合体での1~2マイクロ秒のシミュレーションを分子動力学シミュレーションソフト Gromacs を用いて実施した。また、統計的な精度を上げるためにそれぞれの条件で独立な10本のシミュレーションを実施した。変異や複合体の有無による構造変化の影響を明らかにするために統計ソフト R のプログラムを作成して解析したところ、構造変化に重要であると思われる要因が特定された。