

プロジェクト名(タイトル):

原子レベルでの細胞内のゲノム構造解明

利用者氏名:

○谷口雄一(1)、城村(大野)雅恵(1)、三十尾潔高(2)

理研における所属研究室名:

(1)生命機能科学研究センター 細胞システム制御学研究チーム

(2)株式会社 情報数理バイオ

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

当研究室ではこれまでに、ゲノムの最小構造単位であるヌクレオソームの分解能で、細胞内のゲノム構造を決定する Hi-CO 法を開発しています。この Hi-CO 法は、実験により得られたヌクレオソーム連結頻度を最もよく反映する 3 次元構造を、分子動力学計算プログラムを用いてシミュレーションで再現することでゲノム構造を決定する手法です。今後は、この手法の解像度を上げて、原子レベルでのゲノム構造を決定する研究を行います。膨大な数の原子や分子の間に働く相互作用を、同時にかつ並列して計算するためには、スーパーコンピュータが必要です。そのため分子動力学計算プログラムの開発を行い、スーパーコンピュータを用いてシミュレーションを実行することで、原子レベルでゲノム構造を決定することを目的としています。

分子動力学計算プログラムの主な開発は、株式会社 情報数理バイオに外部委託注して行いました。

2021 年度は、スーパーコンピュータ「富岳」を用いて検討を行いました（課題番号 hp210182）。

2. 具体的な利用内容、計算方法

これまでの Hi-CO 法で得られたモデルから全原子モデルへの変換プログラムを作成し、GROMACS、AMBER や GENESIS を用いて分子動力学計算を行い、分子動力学計算の可否を調査しました。また、ヌクレオソーム内の原子に加え、その周りの溶媒水分子や中和イオンを含めた系や、水溶液なしの Generalized Born 法による分子動力学計算の可否も調査を「富岳」を用いて行いました。

3. 結果

本年度は HOKUSAI を利用していません。

4. 利用がなかった場合の理由

本年度は、スーパーコンピュータ「富岳」を利用してプログラムの開発を行ったためです。