

課題名 (タイトル) :

改良 Amber による蛋白質立体構造計算

利用者氏名 : 山崎 俊夫

所属 : 横浜研究所 生命分子システム基盤研究領域 NMR 分光学研究チーム

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
NMR などからの構造情報を利用して蛋白質分子の立体構造を決定する事が目的だが、実験からの情報が足りない場合が多い。経験的力場を使った計算で妥当な構造を選ぶことが可能である。ところが、蛋白質分子は長い鎖状の分子なので、計算過程で絡まりやすい。この問題を回避する計算法を既存の Amber program に導入して、効果を見る。
2. 具体的な利用内容、計算方法
NMR からの構造情報を少なくして、random 構造から Molecular Dynamics 計算を行う。温度やその他の parameter を変化させる simulated annealing を用いる。小さな蛋白質分子 trp-cage や ubiquitin を使って最適化を試みる。
3. 結果
絡まりを回避するのに有効な方法であることを確認した。ただし、構造情報が多い場合と少ない場合では、様子が違う。多い場合は絡まりを回避することが有効に働き、効率的に構造決定することができた。構造情報が少ない場合には、副作用として、誤った構造にとどまる危険性をもっていることが分かった。
4. まとめ
絡まりを回避するロジックは良い面と悪い面がある。構造情報が少ない場合に有効な方法を必要としていることから、有効かつ副作用が顕在化しない処方を見出さなければならない。
5. 今後の計画・展望
絡まりを回避するロジックは人為的パラメータを含むので、構造情報が少ない場合、蛋白質が少し大きい場合の計算で、パラメータを最適化する。そのためには多くの計算時間が必要である。
6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容
計算が容易なテストケースで、人為的パラメータを最適使用としたが、より難しい計算では、そのまま通用しないことが分かった。じっくり計算をして最適化する必要がある。
7. 利用研究成果が無かった場合の理由
さらに計算をした後、成果にする。MPI を使って並列化を行っているが、8 コア以上では速度が上がらない。実計算時間が必要になっている。

