

課題名 (タイトル) :

拡張アンサンブル法による小タンパク質のフォールディングシミュレーション

利用者氏名 : 光武 亜代理

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 杉田理論生物化学研究室

報告内容

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

本研究では、水中での 50 残基程度のタンパク質のランダムな初期構造からのフォールディングシミュレーションを行なうことを目的としている。全原子系のシミュレーションを用いて伸びた構造からのフォールディングを実現することは、エネルギー関数やサンプリングの問題があるため非常に困難である。本研究では、系の状態を効率良くサンプリングできる拡張アンサンブル法を用いて、これに挑戦する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、系の状態を効率良くサンプリングできる拡張アンサンブル法を用いる。拡張アンサンブル法のひとつであるレプリカ交換法やマルチカノニカルレプリカ交換法を用いて、この問題に取り組む。レプリカ交換シミュレーションは、たくさんの温度の系で同時にシミュレーションを行い、ある頻度で系の温度の交換を行い、サンプリングを良くする手法である。系を大きくするとたくさんの温度の系が必要であるので、大規模な並列計算機が必要である。また、水を陽に取り入れたシミュレーションを行う場合、粒子数が莫大になるので専用計算機などで高速にシミュレーションする必要がある。このために MD-GRAPE3 や GPGPU などの専用ボードを用いて高速化する必要がある。まずは、研究室内の MD-GRAPE3 や GPGPU を搭載した専用計算機を用いて水球中の小蛋白質のシミュレーションを行う。この計算で経験を積んだ上で理研の並列計算機を用いて、大規模なレプリカ交換シミュレーションを行う。

3. 結果

MD-GRAPE3 を用いて 5 残基からなるエンケファリンのレプリカ交換シミュレーションを行った。24A の水球に伸びた構造を入れて、275K から

427.1K までの 36 個の温度を用意してレプリカ交換シミュレーションを行った。力場は AMBER94 を用いた。各レプリカは 4ns のシミュレーションを行った。研究室内の 1 台の MD-GRAPE3 を用いて、レプリカ交換の部分は per1 を用いた。温度空間上のランダムウォークを実現した。常温の通常のシミュレーションの結果に比べて、より広い構造空間をサンプルしていることが分かった。また、GPGPU を搭載した計算機システムを用意し、小蛋白質の分子動力学シミュレーションを実行した。専用ボードを用いることにより、通常よりも数十倍の高速化を行うことができた。

4. まとめ

MD-GRAPE3 を搭載した専用計算機で小さな系でレプリカ交換シミュレーションができることが分かった。GPGPU を搭載した専用計算機で分子動力学シミュレーションを実行し、高速化について検証した。

5. 今後の計画・展望

理研の MD-GRAPE3 や GPGPU を搭載した専用計算機を用いて大規模な計算を行っていく。

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

MD-GRAPE3 を用いて小さな系でレプリカ交換シミュレーションができることが分かった。GPGPU 搭載計算機の有効性も検証した。今後理研の専用計算機を用いて大規模なレプリカ交換シミュレーションを行う。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

小さい系で専用計算機の性能を検証できたが、理研の大規模な並列計算機を利用するところまでできなかった。

平成 23 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Ayori Mitsutake, “Development of Effective Sampling Algorithm and Analysis Method for Biomolecular Simulations”, 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences-Experiments and Simulations, January 9-11 (2012), Nara, Japan (招待講演)

【その他】

招待講演：光武亜代理、「蛋白質系の拡張アンサンブルシミュレーション」、第 24 期 CAMM フォーラム本例会、2011 年 6 月、東京