

課題名 (タイトル) :

レプリカ交換法による膜蛋白質の立体構造予測

利用者氏名 : 岡本 祐幸

所属 : 和光研究所 基幹研究所 杉田理論分子科学研究室

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

生体膜に存在する膜タンパク質は膜の中に挿入するとき、多くの種でトランスロコンとよばれる 2 量体を形成している膜タンパク質の中を通過して膜の中に挿入される。しかし、その機構はいまだ不明点が多い。そのため構造情報によるアプローチが求められるが、立体構造について単量体は高精度の結晶構造があるが、2 量体構造は精度の高いものがなく、その予測構造は議論がわかれている。本研究では、そのため、その単量体構造をもとにして、2 量体構造の予測を行うことを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

計算方法はレプリカ交換モンテカルロ法を用いた。これにより並列計算はレプリカの数である 64 個を行った。さらに初期構造として、単量体の向きがことなる 5 つの初期構造を用いて、計算を行った。一度の計算で 72 時間の使用をおこない 300 万モンテカルロステップの計算を行った。これを各初期構造毎に 15 回行っている。

3. 結果

エネルギーの低い安定な構造は、予測される 2 量体構造の 1 つのモデルに相当する構造であった。

4. 今後の計画・展望

計算結果をまとめてグループ内で伝達することはできた。現在論文の執筆中であるが、論文の結果発表などのためには、計算条件を変えたもので追認が必要である。現在、それを行なっているが、計算機の混み具合によりなかなか進んでいない。

5. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況や、継続して利用する際に行う具体的な内容

論文の反論時に再計算が一部要求される可能性があるため、引き続き利用させていただきたい

6. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

計算時間は十分にいただけたが、プログラムの並列化が効率良く使えなかったため十分な演算時間を用いられなかった。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

論文は現在執筆中である。

## 平成 24 年度 RICC 利用報告書

### 平成 24 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】

岡本祐幸「スピン系および分子系の拡張アンサンブルシミュレーション」物性研究所共同利用スーパーコンピュータ計算物質科学研究センター(CCMS)・元素戦略プロジェクト 合同研究会「計算物性物理学の新展開」、柏市、2013年1月10-11日