

課題名 (タイトル) :

計算機による結合自由エネルギー評価手法の研究

利用者氏名 : ○小松 輝久

所属 : 生命システム研究センター 生命モデリングコア 計算分子設計研究グループ

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

タンパク質などの生体高分子機能を低分子によって自在に制御することを目指し、そのような有益な低分子のデザインを計算機シミュレーションによって探索する。このためには、結合自由エネルギーの評価手法を開発し、信頼性等の評価を積み重ねていく必要がある。

2. 具体的な利用内容、計算方法

前項の目的に向けて、低分子とタンパク質の混合系の計算機シミュレーションを行う環境を構築した。また、自由エネルギー評価手法の研究を遂行するための予備的な数値計算にとりかかった。数値計算手法としては、主に GROMACS ver4.6.1 を用い、演算には PC クラスタを用いた。

3. 結果

本年度は、GROMACS を用いたシミュレーション環境の構築を行った。まとまった成果を得る段階ではないが、タンパク質の構造に制限を加えた計算を PC クラスタ上で行うことを可能にし、予備的な計算に着手した。

4. まとめ

タンパク質構造のような、非常に大きな自由度を持つ系に対して、十分に信頼に足る自由エネルギー評価手法を確立することは、原子分子というミクロスケールから生体を研究するうえで、必要且つ重要なステップであ

る。本課題は、大規模計算によって、計算手法の妥当性評価、確立を目指すものである。

5. 今後の計画・展望

本年度の予備的計算を基盤として、いくつかの具体的手法を適用した計算に取り組んでいく予定である。また、それらの結果を踏まえて、性能評価、改善、開発へと発展させていきたい。