

課題名 (タイトル) :

## Coarse-grained biomolecular simulation by CafeMol

利用者氏名 : ○検崎 博生

所属 : 情報基盤センター

### 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

真核生物の核内では、多数のヌクレオソームが階層構造を作っている。また、DNA の複製や、遺伝子の転写の際は、転写因子などが DNA のさまざまな場所にアクセスする必要がある。このため、クロマチンの内部構造がどのようになっているかは、転写因子の探索などに影響を与えるため非常に重要なことであるが、あまり分かっていない。そこで、我々はタンパク質と DNA の粗視化モデルを用いて、クロマチンの構造サンプリングシミュレーションを行った。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

ヌクレオソームを 20 個つなげた系のシミュレーションを CafeMol を用いて行った。計算では、open MP による 8 コア並列と MPI による 2 ノード並列の合わせて 16 コアでのハイブリッド並列による計算を中心に行った。

### 3. 結果

初期構造として、ヌクレオソームの結晶構造からヌクレオソーム 20 個つなげた規則的な構造をモデリングし、そこから外力を掛けて、慣性半径を拡大縮小するシミュレーションを繰り返し行いランダムな広がった構造を得た。その後ゆっくり慣性半径を縮めるシミュレーションを行い、さまざまなヌクレオソーム密度でのクロマチン構造の初期構造を得た。最終的に、いくつかのヌクレオソーム密度での初期構造からシミュレーションを行いクロマチンの構造サンプリングを求めた (図 1)。ヌクレオソーム間の距離のヒストグラムなどを求め、クロマチン構造の特徴を明らかにした。

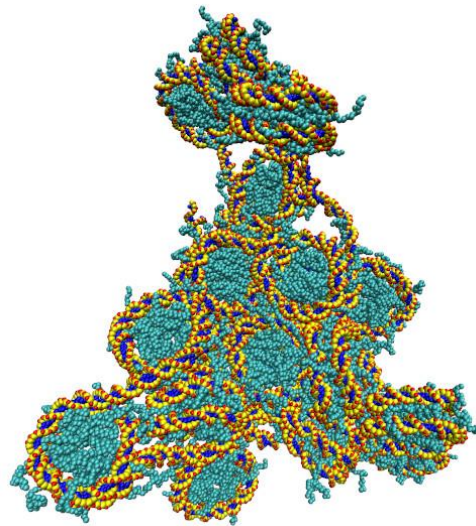


図 1 ヌクレオソーム 20 個の構造サンプリングのスナップショット。ヌクレオソーム密度 0.3mM、 $\text{Na}^+=200\text{mM}$  時の計算結果。

また、ヒストンテイルの電荷を消去するなどの条件を変えた計算を行った。このとき、どのヒストンテイルの電荷を消去してもヌクレオソーム間の相互作用は弱まったが、どの領域が不安定化し、どのように構造変化するかによっては違いがみられた。

### 4. まとめ

クロマチンの構造探索シミュレーションを行った。いくつかの条件でのサンプリングを行い、クロマチンのローカルな構造を得ることができたが、今後条件を変えるなどして、さらに計算を進める必要がある。

### 5. 今後の計画・展望

クロマチン構造のサンプリング計算をさらに進めたい。また、H1 ヒストンタンパク質などを入れた時の構造の変化や、転写因子を入れた時のシミュレーションなども進めたいと考えている。

平成 25 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】**

発表者：検崎博生

所属：情報基盤センター

演題：ヌクレオソームとクロマチンの構造ダイナミクス

会議名：第 2 回天然変性蛋白質計算科学セミナー

日時：2014/2/10-11

場所：御殿場、日本

発表者：検崎博生

所属：情報基盤センター

Title : Structural dynamics of protein and DNA system by coarse-grained simulations

会議名 : Joint Workshop on Bio-inspired Engineering and Bio-supercomputing

日時：2014/3/4-5

場所：千葉、日本

**【その他】**

ポスター発表

発表者：検崎博生

所属：理化学研究所 情報基盤センター

演題：粗視化モデルによるヌクレオソームとクロマチンのシミュレーション

会議名：計算統計物理学第 4 回研究会

日時：2013/10/5-6

場所：宇部、日本

ポスター発表

発表者：検崎博生<sup>1</sup>、高田彰二<sup>2</sup>

所属：情報基盤センター<sup>1</sup>、京都大学理学研究科<sup>2</sup>

演題：粗視化シミュレーションによる多ヌクレオソーム系の構造ダイナミクス

Title : Poly-nucleosome structural dynamics by coarse-grained simulations

会議名：第 51 回日本生物物理学会年会

日時：2013/10/28-30

場所：京都、日本