

提出日：平成 28 年 5 月 11 日

平成 27 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

## (2) 研究成果の概要

課題名	量子力学/古典力学連成ポテンシャル分子動力学シミュレーションによる生体高分子の研究		
研究代表者	氏名	米澤康滋	
	所属機関名・部局名	近畿大学・先端技術総合研究所	
	職名	教授	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	国際共同研究課題	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村春木		
<p>量子力学(QM)と古典力学(MM)が連成する QM/MM 分子シミュレーションはその創始者である A.Warshel の 2013 年ノーベル賞受賞などもあり、今や一般的な手法として多用されているが、その MD シミュレーションの蛋白質への応用研究はその方法論が十分に確立されておらず、QM/MM ポテンシャルを活用した有限温度下での自由エネルギー計算科学は殆ど進展していない。</p> <p>このような問題点を克服するために、我々はこれまで開発してきた QM/MM 連成分子動力学シミュレーションを使って緑色発光蛋白質の変異型蛋白質の発色波長変化の分子機構を解明するシミュレーション研究を実施した。また蛋白質のダイナミクスを考慮する為にさらに大規模な超並列 QM/MM 計算を実行して蛋白質構造空間を網羅するサンプリングシミュレーションを実現した。そのデータを基に蛋白質分子機構の詳細と蛋白質の構造機能との相関を詳細に明らかにする事を目指している。</p> <p>本年度はこれまで共同開発を進めてきた高並列マルチレベル分子動力学シミュレーションプログラム platypus に様々な開発・改良を実施してさらに高速かつ精密な計算シミュレーション実現を目指す事を研究目的とし、さらに platypus の研究開発に関する論文を完成させてその性能を国内外に広報する事を目指した。我々は、Platypus-QM 及び QM/MM の並列演算性能と信頼性を、精細に測定・評価した。これに加えて QM 計算に係るアルゴリズムの見直しを行い、大規模行列に関わる演算性能を改善することができた。その結果、GFP 色素分子の水中における基底状態及び励起状態 QM/MM 計算を実行して QM/MM 計算の信頼性及び高い並列演算性能を確認することができた。</p> <p>これらの成果を国内外に広く公表すべく様々な生命科学的な応用例を用いて Platypus-QM 及び Platypus-QM/MM の基本性能及びソフトウェア構成を紹介する研究論文を作成した。この論文(表題: Development of massive multi-level molecular dynamics simulation program, Platypus (PLATform for dYnamic Protein Unified Simulation), for the elucidation of protein functions) は 2016 年初頭に Journal of Computational Chemistry に採択され掲載されている。</p>			

※本様式は、“拠点事業成果報告”として、拠点ホームページにて公開させていただく予定です。

※必ず A4 用紙 1 枚におさめて下さい。 ※提出期限：平成 28 年 5 月 20 日（金） ※提出の際は PDF 変換して下さい。

※提出先：大阪大学蛋白質研究所拠点プロジェクト班 E-mail: tanpakuken-kyoten@office.osaka-u.ac.jp