

提出日：平成 29 年 4 月 20 日

平成 28 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	分子動力学計算プログラム myPresto/omegagene の開発と応用		
研究代表者	氏名	笠原浩太	
	所属機関名・部局名	立命館大学・生命科学部	
	職名	助教	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村春木		
<p>分子動力学法は蛋白質など種々の分子系の微視的な動きを解析するためのシミュレーション技術である。実験では解析困難な原子レベルでの知見を高精度に解析可能であるが、高い計算コストが問題となっている。これを解決するため、中村春木教授らのグループが開発を進めてきた高速かつ高精度な静電相互作用計算理論、および高効率の構造サンプリング手法に着目し、これら独自の計算理論を高効率に実行可能な分子動力学計算プログラム myPresto/omegagene の開発を行った。特徴として、これら独自の方法に最適化された設計となっており、さらに GPGPU を活用した高速計算が可能となっている。開発したソフトウェアはマニュアル等の整備を行い、オープンソースソフトウェアとして Apache software license 2.0 に基づいて公開した。URL は次のとおりである：http://www.protein.osaka-u.ac.jp/rcsfp/pi/omegagene/。この成果は査読付き論文誌において発表した。[Kasahara K, Benson M, Goto K, Dasgupta B, Higo J, Fukuda I, Mashimo T, Akiyama Y, Nakamura H, “myPresto/omegagene: a GPU-accelerated molecular dynamics simulator tailored for enhanced conformational sampling methods with a non-Ewald electrostatic scheme”, <i>Biophysics and Physicobiology</i> (2016) 13:209-216]</p> <p>ソフトウェアの開発に加え、中村春木教授、肥後順一客員教授らと共に分子動力学計算に応用可能な新たなサンプリング手法を開発した。トイモデルではあるが、通常のサンプリング方法では困難な、複雑なエネルギー地形の探索が可能であることを示した。[Higo J, Kasahara K, Dasgupta B, Nakamura H, “Enhancement of canonical sampling by virtual-state transitions”, <i>The Journal of Chemical Physics</i> (2017) 146(044104):1-12]</p> <p>中村春木教授らのグループが開発した myPresto/psygene を活用し、実験系のグループとの共同で転写因子 Ets1 とパートナー転写因子との協調的結合による機能制御の分子機構を明らかにした。[Kasahara K, Shiina M, Fukuda I, Ogata K, Nakamura H, “Molecular mechanisms of cooperative binding of transcription factors Runx1–CBFβ–Ets1 on the TCRα gene enhancer.”, <i>PLoS ONE</i>, (2017) 12(2): e0172654]</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 29 年 5 月 19 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