

計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の
開発と応用

2016 年度採択研究者

2018 年度
実績報告書

松永 康佑

理化学研究所計算科学研究センター
研究員

生体分子動態解析のためのデータ同化基盤の開発と応用

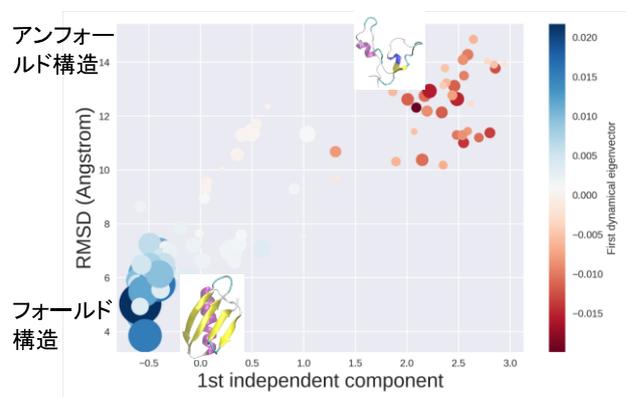
§ 1. 研究成果の概要

本課題は、生体分子シミュレーションと実験計測データを融合させて分子構造情報を伴った動的プロセス(動態)のモデリングを実現することで、これまで見えなかった生体分子の構造変化プロセスや分子認識における中間構造・パスウェイを明らかにし、そのメカニズムを理解することを目的とする。手法を種々の計測データに対して一般化することを通して、生体分子の動態を解析する基盤の創出を目指す。今年度は、応用するのが難しかった中規模サイズのタンパク質である Protein G のフォールディングダイナミクスの解析と、これまでと異なる計測データである高速 AFM データへ向けた研究を行った。

Protein G のフォールディングはサイズが大きい
ため網羅的に構造空間をサンプルすることが難
しい。そこで、多数の短いシミュレーションを効
率的にばらまいて、後でマルコフ性の近似の下
でモデリングにより統合するアプローチを適用し
た。その結果、各シミュレーションの長さもはる
かに長時間のフォールディング/アンフォール
ディングに相当する運動を捉えることができた。
また、別のモデルにおいて高速 AFM 像をエミュ
レートし、高速 AFM データとデータ同化を行う
準備を整えた。

図： Protein G のマルコフ状態モデル。

丸が各状態、サイズが遷移確率の固有値を示す。



§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 松永 康佑 (理化学研究所計算科学研究センター 研究員)
- ② 研究項目
 - ・タンパク質のシミュレーション
 - ・マルコフ状態モデリングとデータ同化