

マルチスケールシミュレーションを用いた RNA 立体構造予測

亀田 倫史

創薬分子設計チーム, CBRC, AIST

RNA の二次構造予測は何十年も前から行われてきたが、立体構造予測に関する研究は、ほとんど行われてこなかった。

蛋白質立体構造予測が広く研究されてきたのと比べると対照的である。

蛋白質は 20 種類のアミノ酸からなり、DNA、RNA は 4 種の核酸からなる。一見、核酸の方がより簡単なシステムに見えるのに、なぜこれまで立体構造予測は行われてこなかったのであろうか？

それは、核酸の立体構造があまり解かれていなかったことに加えて、核酸がアミノ酸に比べて大きいことがあげられる。

最大のアミノ酸であるトリプトファンは 24 原子からなるが、

最小の核酸であるウラシルですら、30 原子からなる。

つまり核酸は案外大きな系であるため、計算するのが難しいというわけである。

そこで我々は、1 核酸を 3 つの球で表現した粗視化モデルを作成し、これを全原子モデルと組み合わせたマルチスケールシミュレーションを用いて立体構造予測を行っている。

現在、我々の計算システムを、スパコン京で動かし、多数の RNA 配列に対する網羅的な立体構造予測を行うべく、準備を進めている。本発表では、現在の進展状況を述べる。