

酵素の補酵素特異性改変に関する研究

大阪大学 情報科学研究科 杉木創, 二井手哲平, 戸谷吉博, 清水浩

目的 任意の酸酵素の補酵素特異性に影響するアミノ酸残基を機械学習モデルで調査し、補酵素特異性に関わる重要残基の位置を立体構造予測により推定することを目的とした。

内容 酸化還元酵素の全てのアミノ酸残基を説明変数として機械学習を実施することで、補酵素特異性に関わるアミノ酸残基を同定する。同定された残基は立体構造のどこに位置するかをタンパク質の構造予測により推定する。

結果 機械学習モデルより、ある酸化還元酵素の補酵素特異性に関わるアミノ酸残基の同定に成功した。同定されたアミノ酸残基の位置をRosettaソフトウェアを用いた構造予測により位置を推定したところ、補酵素との相互作用部位だけでなく、その立体的に外側の領域も重要であることが明らかとなった。

利用した計算機	OCTOPUS
ノード時間	2500時間
使用メモリ	3,800GB
並列化	20並列

