

スパイクタンパク質の残基間相互作用エネルギーの テンソル分解による解析

Tensor decomposition based analyses on interaction energies
among residues of the spike protein

立教大理¹, 東大生研², 星薬科大³, 産総研⁴, 神戸大院シス情⁵

○奥脇弘次¹, 秋澤和輝¹, 畑田峻¹, 望月祐志^{1,2}, 福澤薫³,

古明地勇人⁴, 田中成典⁵

Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo.², Hoshi Univ.³, AIST.⁴, Kobe Univ.⁵,

○Koji Okuwaki¹, Kazuki Akisawa¹, Ryo Hatada¹, Yuji Mochizuki^{1,2},

Kaori Fukuzawa³, Yuto Komeiji⁴, Shigenori Tanaka⁵

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】 私たちは、「富岳」の上で行った SARS-CoV-2 の関連タンパク質に関する大規模なフラグメント分子軌道(FMO)計算に基づく相互作用解析を報告してきました[1-5]。今回の発表では、スパイクタンパク質の残基間相互作用エネルギーの巨大なデータセットにテンソル分解を適用し、構造安定性に関わる重要残基を導出した文献[5]の内容をご紹介します。

【解析】 スパイクタンパク質は、1.1 千残基の鎖 3 本が絡みあって構成されています。受容体結合領域(RBD)が閉じた構造(PDB ID=6VXX)と開いた構造(6VYB)について、スケーリング修正した MP2.5/6-31G*レベルの相互作用エネルギー(IFIE)のデータセットを解析の対象としました(文献[3]を参照)。まず、特異値分解(SVD)によって 2 本鎖間の相互作用で重要な残基をリストし、それらの組み合わせから 3 本鎖間の相互作用解析(エネルギーは幾何平均で評価)をテンソル分解の一種である CP 分解で行いました。CP 分解では、SVD に似てコアテンソルが対角化表現となるため、情報圧縮度が高くなります。なお、SVD、CP 分解の処理には TensorLy [6]を用いました。

【結果の一例】 紙面の都合から、ここでは 6VXX 構造の固有モード 2 と 3 について記します。モード 2 の固有ベクトルの解析から、Glu1031 と Arg1039 の寄与が 3 つの鎖の全てで大きくなります(右図は、B 鎖についての位置)。モード 3 では、Arg1091 と Asp1118 の寄与が支配的です。これらの残基は、構造安定性に関わる重要なものと同定されます。

【謝辞】 スパイクタンパク質の構造調製の際の MD 計算は東工大の TSUBAME3.0 (BINDS 枠: JP19an0101113)で、FMO 計算は理研 R-CCS の「富岳」の新型コロナウイルス関係の特別枠(g9330001)で行いました。

【文献】 [1] R. Hatada, et al., *Appl. Phys. Express* **14** (2021) 027003. [2] S. Tanaka et al., *J. Phys. Chem. B* **125** (2021) 6501. [3] K. Akisawa et al., *RSC Adv.* **11** (2021) 3272. [4] K. Akisawa et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **60** (2021) 090901. [5] K. Okuwaki et al., *Appl. Phys. Express* **15** (2021) 017001. [6] <<http://tensorly.org>>.

