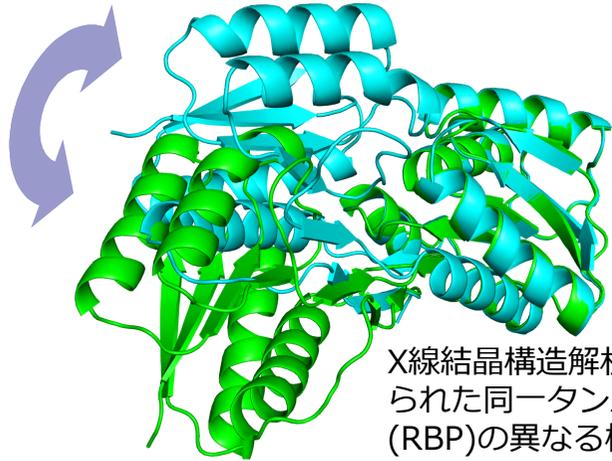


タンパク質の構造変化

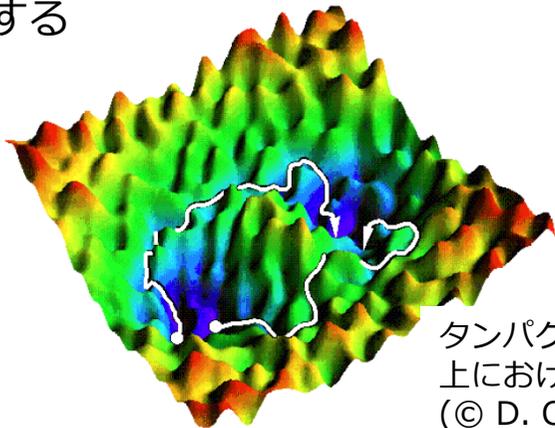
→酵素反応、シグナル伝達に重要な役割



X線結晶構造解析で得られた同一タンパク質 (RBP) の異なる構造 (PDB id: 1ba2, 2dri)

我々の目的

タンパク質構造変化が起こる上で**エネルギー的に有利な(より確率の高い)パス**を**計算機によりサンプリング**し、遷移状態を同定するとともに反応速度定数を予測する

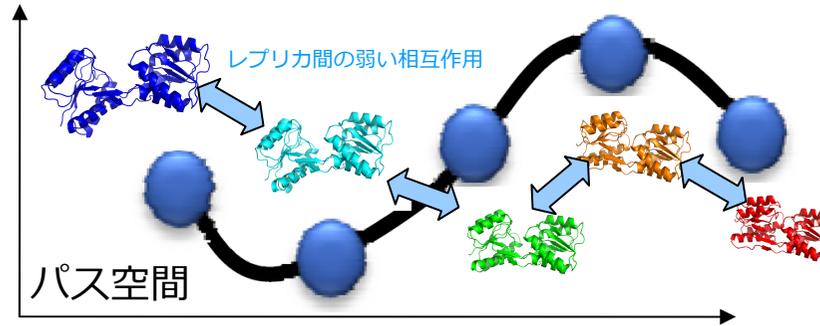


タンパク質の複雑なエネルギー地形上における構造変化パスの概念図 (© D. Chandler group)

パス空間におけるサンプリング(ストリング法)

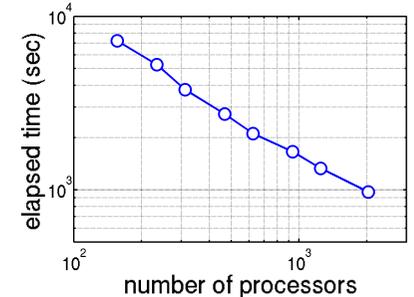
互いに弱い相互作用をする**多数のレプリカシミュレーション**により**高次元パス空間を並列に探索**

レプリカ間の通信は疎であり並列度が高いアルゴリズムである



理研・次世代計算科学研究開発プログラム(分子スケール)により独自に開発されたマルチコピーMDシミュレーションライブラリ(寺田ら,2009)を使用して実装

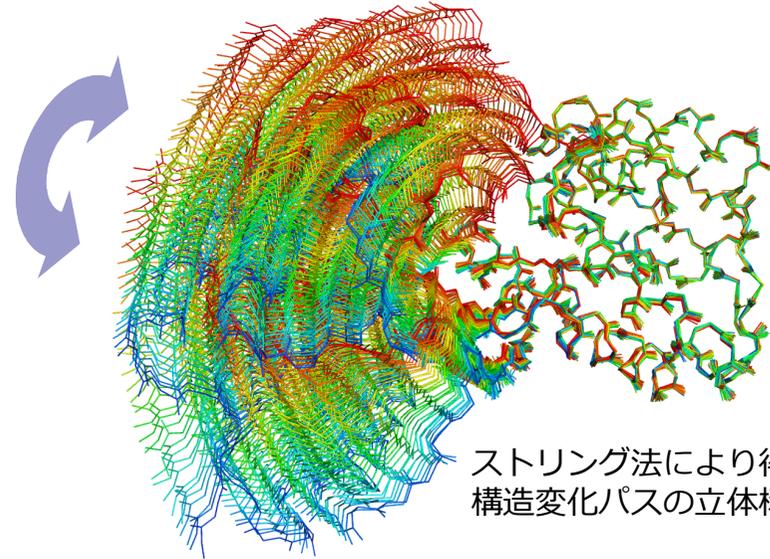
RBPで78個のレプリカを用いた10psのストリング法計算のベンチマーク結果



理研RICC 超並列PCクラスタ (Intel Xeon: 2.93GHz)を使用

より効率的なサンプリング手法の提案

集団座標(主成分)空間でのサンプリング→滑らかなエネルギー地形
レプリカ交換法によるパスの部分的交換→ローカルな谷からの脱出



ストリング法により得られたRBPの構造変化パスの立体構造図