

天然変性蛋白の生物学，物理学的理解のための大規模計算科学利用

- 目的

天然変性蛋白質は生物学的にその役割の新奇性が注目されている。また、真核生物の細胞核内に普遍的に存在することも分かってきた。天然変性タンパク質の熱力学的理解のため大規模計算科学を応用する。

- 内容

天然変性蛋白質の物理学的性質を表すモデルの構築、及び実験を説明するマルチカノニカル分子動力学シミュレーションやマルチカノニカルモンテカルロシミュレーション手法の開発と実行。

- 結果

- 天然変性蛋白質の特異性を再現する連想記憶モデルの構築
- 上記連想記憶モデルを扱うモンテカルロシミュレーター開発
- 天然変性蛋白質の構造多様性を再現。
- 天然変性蛋白質のシグナル伝達機構の説明。



利用マシン: PCクラスタ/ CPU時間 : 240時間