

課題名 (タイトル) :

## 細胞内混雑下における生体高分子の構造およびダイナミクス

利用者氏名 : ○狩野 康人\*, 宮下 尚之\*, Raimondas Galvelis\*\*, 岩橋-小林千草\*\*, Jaewoon Jung\*\*, 松永康佑\*\*, Michael Feig\*, 柏原 裕美\*, 安藤格士\*

所属 : \*生命システム研究センター 分子機能シミュレーション研究チーム  
\*\*計算科学機構 粒子系生物物理研究チーム

## 課題 1: 細胞内混雑下における生体高分子の構造およびダイナミクス (狩野、安藤)

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

生体細胞内にはタンパク質、核酸などの生体高分子が非常に混み合った状態で存在しており、その中で各分子はそれぞれの機能を発揮する。分子動力学法を用いてこの状態を解析する場合、実際の細胞の環境を再現するために分子混雑の効果を取り入れ、さらには溶媒である水分子も考慮した計算を行う必要がある。しかしながら、現在の計算機の性能を持ってしても、この膨大な自由度を持つ系の長時間の計算は困難である。そこで、本研究では生体高分子の粗視化モデルを構築し、水分子を連続体とみなし流体力学的相互作用を取り込むブラウン動力学 (BD) 法の開発を試みた。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

$N$  粒子からなる系の流体力学的相互作用を考慮した BD 法の数値積分スキームは、以下の式で表される。

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{M}\mathbf{f}\Delta t + \mathbf{g}, \quad (\text{式 1})$$

$$\mathbf{g} = \sqrt{2k_B T \Delta t} \mathbf{B}\mathbf{z} \quad \text{with } \mathbf{M} = \mathbf{B}\mathbf{B}^T. \quad (\text{式 2})$$

ここで、 $\mathbf{r}$  は粒子の位置、 $\mathbf{f}$  は粒子にかかる力、 $t$  は時間、 $\Delta t$  はタイムステップ、 $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は温度、 $\mathbf{M}$  は流体力学的相互作用を表す  $3N \times 3N$  のモビリティ行列、 $\mathbf{g}$  は揺動散逸定理を満たすブラウンノイズである。流体力学的相互作用は静電相互作用と同様、粒子間距離を  $r$  とすると  $1/r$  で減衰する長距離相互作用のため、 $\mathbf{M}$  は密行列となり、周期境界条件でのシミュレーションではエwald法が必要となる。そのため、計算量とメモリ量は  $O(N^3)$  でスケールすることになる。

また、 $\mathbf{B}$  は  $\mathbf{M}$  のコレスキー分解で求められる。この計算量は  $O(N^3)$  である。この  $O(N^2)$  のメモリ量と、 $O(N^3)$  の計算量が、BD 法の大規模計算を困難にさせている。この問題を克服するため、エwald計算の部分は FFT を利用する Particle-Mesh Ewald (PME) に置き換え、かつ、ブラウンノイズ  $\mathbf{g}$  の計算には Krylov 部分空間法を導入したアルゴリズムを開発した。PME は  $O(\text{Mlog}M)$  の計算量で  $\mathbf{M}\mathbf{f}$  (式 1、右辺第 2 項) の計算を可能にし、さらに Krylov 部分空間法と PME 法を組み合わせることで、 $\mathbf{g}$  を  $O(\text{Mlog}M)$  で計算可能と期待できる。また、PME 法は  $\mathbf{M}$  を行列の形で構築する必要がないため、メモリ量も  $O(N)$  でスケールすると考えられる。

## 3. 結果

現時点では、デスクトップマシーン (12 cores) を用いた、小規模なテスト計算のみが終了している。テストには粗視化モデルで表された 64 個のタンパク質を含む系を用い、その粒子数は 12,608 である。その結果、通常の BD 法では 1 ステップあたり 5.2 秒かかっていたところを、今回開発したアルゴリズムでは 0.68 秒と、約 8 倍の高速化を実現した。

## 4. まとめ

流体力学的相互作用を考慮した大規模 BD シミュレーションに向け、PME 法と Krylov 部分空間法の開発を行った。その結果、12,608 粒子の系で、従来の方法に比べ約 8 倍の高速計算が可能となった。

## 5. 今後の計画・展望

アルゴリズムの MPI 並列化を試み、さらなる高速計算を目指す。具体的には、粒子を  $Z$  座標の位

置応じて空間分割し、FFT の並列計算を行う。次に、細胞内環境を模倣した系を粗視化モデルで構築し、BD シミュレーションを行う。その結果から、細胞内混雑が生体高分子のダイナミクスに与える影響についての解析を行う。

#### 6. 利用がなかった場合の理由

アルゴリズム開発に長く時間を要してしまい、2013 年度内に RICC での大規模計算を行うまでには到らなかった。

### 課題 2 : 生体膜中のラフトと APP (タンパク質) との相互作用 (宮下、柏原)

#### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

生体膜は細胞や細胞小器官の内外の空間を隔て、細胞形成や細胞活動には必須である。生体膜は主に、グリセロリン脂質、スフィンゴ脂質、コレステロールなど、複数種類の脂質分子からできている。さまざまな組成できている為に、生体膜 (混合膜) には、数十~数百ナノメートルサイズのスフィンゴ脂質とコレステロールの多く含まれたマイクロドメイン (ラフト) 領域ができる事が知られている。生体膜には膜タンパク質が存在し、膜内外のインターフェースとして機能している。近年、生体膜の組成 (ラフトなど) が膜タンパク質の機能に影響する事がわかってきた。例えば、アルツハイマー病の原因の一つであるアミロイド前駆体タンパク質 (APP) も、ラフト内外で酵素との結合活性や構造安定性の異なる事が実験でわかっている。しかし、現状、その原因の詳細構造はわかっていない。将来の医学や創薬に繋がる疾患機構の理解の為には生体環境中の膜タンパク質について、理解を深める必要がある。この研究から、混合膜の成分の違いが膜タンパク質の揺らぎやダイナミクスを変え、単一膜の実験で得られた立体構造とは異なる構造や安定性をもたらすという結果を出す事を目標とする。

#### 2. 具体的な利用内容、計算方法

レプリカ交換分子動力学法を用いた構造サンプリングのテスト (REIN プログラムを利用)。

本計算には多くのリソースが必要となるので本計算は京コンピュータを用い、検証計算や準備計算に RICC を利用した。具体的には REIN-K と namd2 を用いたレプリカ交換アンブレラサンプリングシミュレーションを実施した。

#### 3. 結果

脂質膜の種類の違いで、APP の構造揺らぎが異なる事がわかった。具体的には脂質分子が POPC の方が POPG より揺らいでいる事がわかった。しかし、計算に予定以上の時間がかかり、未だ最終結果までは至っていない。

#### 4. まとめ

脂質分子の種類による膜タンパク質の構造安定性の結果は出つつあるが、未だ最終結果に至っていない。来年度に引き続き継続する。

#### 7. 今後の計画・展望

未だ最終結果に至っていないので、次年度も引き続き継続して計算を実施する。

### 課題 3 : Development of Metadynamics for Accelerated Free Energy Calculations (Galvelis)

#### 1. Background and purpose of the project, relationship of the project with other projects

The fundamental understanding of biological systems by atomistic-level simulations requires free energy calculation, which is inherently a problem of conformation space sampling. Metadynamics, an adaptive-biasing technique, has proven its efficiency for accelerating sampling. The method estimates the free energy by iteratively updating a biasing potential in a predefined collective variable space.

#### 2. Specific usage status of the system and calculation method

The system was used to test and benchmark the new implementation of metadynamics in GENESIS. However, due to changes in the

development schedule, the usage of the system was not as intensive as expected.

### 3. Result

Several extensive simulations of short peptides in solvent were performed to demonstrate metadynamics better computational efficiency versus RUES, a well-established free-energy calculation method.

### 4. Conclusion

A production-level metadynamics has been implemented in GENESIS and tested on polypeptides. It will allow a more computationally efficient free energy simulations of biologically systems.

### 5. Schedule and prospect for the future

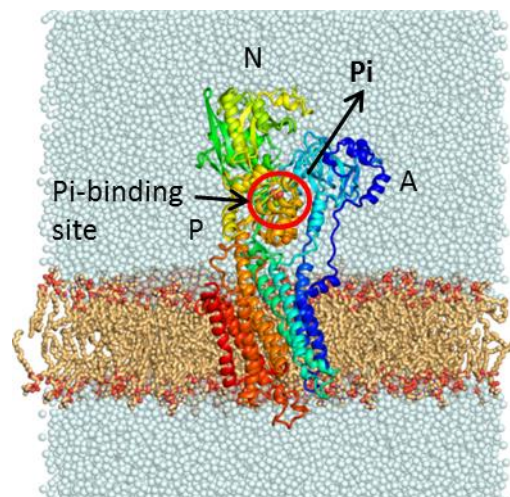
The further development of metadynamics with a specific interest to increase the computation efficiency of multi-replica metadynamics algorithms by incorporating advance replica exchange schemes.

## 課題 4: イオンポンプの反応機構についての理論的研究 (岩橋 - 小林)

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

膜輸送タンパク質であるイオンポンプは、細胞内外のイオンの濃度を厳密に制御しており、様々な生命活動に非常に重要な役割を担っている。機能の発現には、ATP 加水分解やイオンの輸送に伴う構造変化が大きな役割を与えていることが実験研究から明らかにされている。本課題では、反応に伴う構造変化の分子論的機構を明らかにし、リガンド結合・解離などの反応が膜輸送へどのように繋がるのかといった問題を明らかにすることを目的とする。今年度は代表的なカルシウムイオンポンプ(SERCA)における反応サイクル上の構造変化を解析し、更にリガンド解離反応によってどのような構造変化が誘起されたのかについて

て研究を行った。



SERCA と Pi の解離

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究は、共同研究者である名古屋大学の太田教授らが開発したドメイン運動の解析手法を SERCA の反応サイクル上の結晶構造に適用することにより、構造変化の解析を行った。その結果、リン酸化された残基からのリン酸(Pi)解離・結合過程において、結合部位を持つ P ドメイン内部が構造変化を起こすことが明らかになった。そこで、この構造変化における原子論的描像を解析するため、Pi を結合部位から引き抜く力をかける Steered MD 法による SERCA の全原子モデル計算を行った。この計算には、分子動力学ソフトウェア NAMD を用いた。系は約 37 万原子であり、温度は 310 K に設定し、まず始めの 30 ns は Pi の位置を結合部位の残基に対して拘束し、その後の 20 ns で Pi の位置を結合部位より遠ざけるような力を加えた。また、反応の終状態である E2 状態の通常の MD 計算を 100 ns 行い、Steered MD での最終構造との比較も行った。

### 3. 結果

Steered MD による Pi の解離によって、結合部位であるβシートが一部開くことが分かった。それにより親水性残基からなる結合部位が溶媒中に露出し、水分子が結合部位に挿入した。これらの一連の水素結合ネットワークの変化により、結合部位を持つ P ドメインの構造変化が起きることを示した。この構造は、終状態の構造とも一致

する。更に、前述のドメイン運動解析手法により示された構造変化とも対応している。Pi 解離における構造変化の詳細なメカニズムを明らかにした。

#### 4. まとめ

最近開発されたドメイン運動の解析手法を SERCA の各反応状態の構造に適用することにより、反応に伴う構造変化の解析を行い、ドメイン運動と構造変化の様相を明らかにした。本研究では、Pi 解離の全原子 MD を行うことにより、反応に伴う構造変化の原子論的メカニズムを明らかにした。このように、ドメイン運動の解析手法と、MD 計算を組み合わせることにより、様々な運動や構造変化に隠されてきた、反応に重要な運動、構造変化を抜き出し、詳細なメカニズムの解析が可能になることを示した。

#### 5. 今後の計画・展望

現在、前出のドメイン運動の解析手法を用いて、新しいタンパク質粗視化ポテンシャルを開発中である。今後は、この粗視化モデルを用いて、イオンポンプなどの反応サイクルを通した構造変化によって生体機能を発現する系の MD 計算を行う予定である。そして、最終的には共通化したモデルを作成したいと考えている。

### 課題 5: Development of Molecular Dynamics Program and Its Application with QM/MM (Jung, Feig)

#### 1. Background and purpose of use project, relationship of the project with other projects

The major bottleneck in molecular dynamics (MD) simulations of biomolecules exist in the calculation of pairwise non-bonded interactions, in particular short-range interaction in particle-Mesh Ewald (PME). However, the evaluation of energy and gradient includes time-consuming square roots and complementary error functions. Moreover, parallelization of MD is not straightforward due to communications in MD.

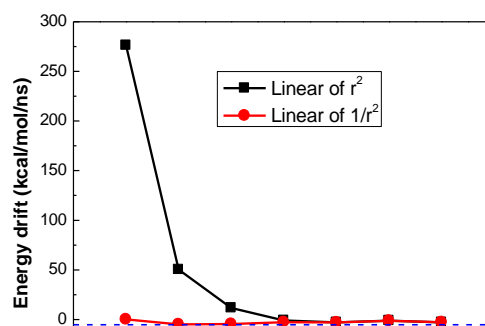
#### 2. Specific development of calculation method

1) New lookup table approach for short-range interactions: For faster evaluation of MD, we introduce a new lookup table by defining energy and gradient as a linear function of inverse distance squared. With this approach, fast non-bonded interactions are available owing to efficient usage of cache memory.

2) Parallelization: Another approach of fast MD is efficient parallelization. Nowadays, many computers have multicore processors, including RICC. For these machines, we introduce a hybrid (MPI + OpenMP) parallelization with domain decomposition scheme.

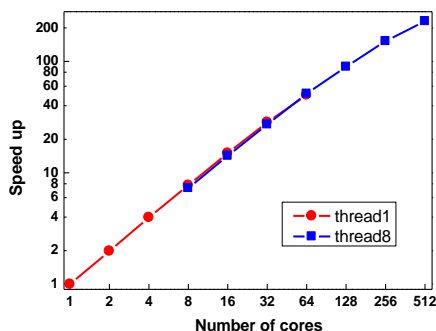
#### 3. Result

The new lookup table approach developed by us definitely increase the accuracy compared to the existed one, which could be identified by energy drift according to the number of table points (Figure shown below). Moreover, it is even faster due to efficient cache memory.



Energy drift as a function of number of table points

Our parallelization method increases the speed dramatically for large system MD simulations. For a system including 20,000 atoms, it is well scalable up to 512 cores and shows less than 4 ms/step.



#### 4. Conclusion

We have developed methods for fast evaluation of non-bonded interactions in MD: lookup table approach and parallelization. These are useful for many-core machines like RICC.

#### 5. Schedule and prospect for the future

Based on the present development, we plan to investigate conformational changes of large proteins and develop several important tools for free energy calculations.

### 課題 6 : 逐次データ同化によるタンパク質動態の解析 (松永)

#### 1. 本課題の研究の背景、目的

生体内の酵素反応やシグナル伝達には、タンパク質立体構造だけでなく分子機械としてのダイナミックな構造変化が重要な役割を果たしている。近年の 1 分子計測技術の発達により、こうしたタンパク質構造揺らぎを直に観察することが可能となってきたが、得られるデータは限られた構造部位に関する低次元情報であることが多く、そこから高次元状態空間ないしはネットワークの状態遷移モデルを構築することはデータ数の制限もあり困難であることが多い。一方、多次元状態(構造)空間をサンプルするには、分子動力学シミュレーションが有用であるが、原子レベルの解像度をもつ高精度なモデルでは、構造変化などのレアイベントをサンプルすることは未だ困難である。また、仮にサンプルし得たとしてもタンパク質フォールディングなどのシビアな問題になると力場パラメータの微妙な差が大き

く影響し、選んだ力場パラメータによって異なるフォールディング機構を生む場合がある。

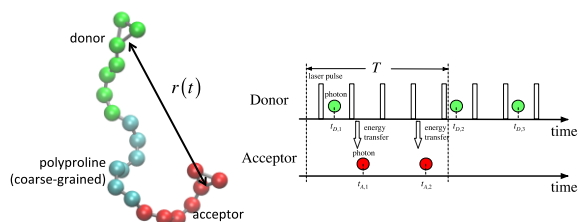
このような問題意識から、本研究では 1 分子の Förster resonance energy transfer (FRET) 時系列データからシミュレーションによって低次元→多次元の「逆問題」をサンプリングし、限られた実験データから多次元情報に基づいた状態遷移モデルを構築する手法の開発に取り組んできた。昨年度は、統計数理の分野で開発された「粒子フィルタ」をベースに粗視化モデルコードへアルゴリズムを実装したが、実際の 1 分子 FRET データへ応用するには未だ重大な課題があり、それらを克服するための研究を行った。

#### 2. 具体的な利用内容と結果

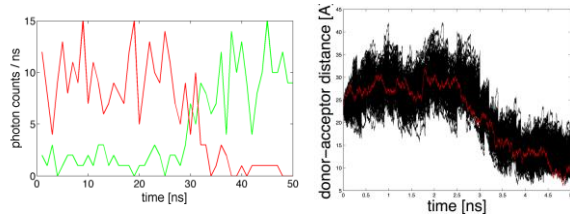
以下の 2 つの課題について実装し、計算を行った。

(1) 粒子の数が探索空間に比べて少ない場合、実験データから計算される尤度が小数の粒子のみに集中してしまい、探索能力が著しく悪くなる場合がある(退化の問題)。これは特にタンパク質など高自由度系において顕著であることが分かった。そこで退化の問題を可能な限り防ぐために、中野らによって提案された Merging Particle Filter (混合粒子フィルタ, Nakano et al., Nonlin. Processes Geophys. (2007))を実装した。簡単な模擬 FRET 時系列を使って性能が出ることを確認した。

(2) 実験データから尤度計算を行う際、これまで FRET データを単純に距離情報、実験ノイズをガウシアンとして尤度計算を行っていた。しかし、実際の FRET データは光子計数データであるため距離情報とは異なる扱いが必要であった。そこで光子計数データの場合の尤度を導出し、粒子フィルタのプログラムへ実装した。Poly-proline の粗視化モデルを例に、簡単な模擬光子計数データを使って、正しく推定できることを確かめた。これにより、photon-counting noise や linker-fluctuations といった 1 分子 FRET 特有のノイズを陽に取り扱えるように成った。



光子計数データの概念図



光子計数データ(左図)からの距離の推定結果(右図)  
黒線は各粒子の軌跡。赤線が真の答え。

### 3. 今後の計画・展望

現在、今期の成果を取りまとめた論文を執筆中である。今後は、実データへの応用を視野に入れて、ユビキチンのフォールディングデータへの適用に向けた準備を進めている。既にユビキチンの粗視化モデルを作成し、簡単なフォールディングシミュレーションに取りかかっている。



平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

1. Takaharu Mori, Jaewoon Jung, and Yuji Sugita, "Surface-Tension Replica-Exchange Molecular Dynamics Method for Enhanced Sampling of Biological Membrane Systems", *Journal of Chemical Theory and Computation*, 9, 5629-5640 (2013)
2. Jaewoon Jung, Takaharu Mori, and Yuji Sugita, "Efficient lookup table using a linear function of inverse distance squared", *Journal of Computational Chemistry*, 34, 2412-2420 (2013)
3. 松永康佑 “遷移パス理論とストリング法によるタンパク質構造変化の解析” 統計数理 特集：生体高分子の揺らぎとダイナミクス –シミュレーションと実験の統計解析– (印刷中)
4. 松永康佑 “ストリング法によるタンパク質構造変化の解析” 分子シミュレーション研究会会誌 アンサンブル **16**, 29-35 (2014)
5. Y. Matsunaga, A. Baba, C.-B. Li, J. E. Straub, M. Toda, T. Komatsuzaki, and R. S. Berry, "Spatio-temporal hierarchy in the dynamics of a minimalist protein model" *The Journal of Chemical Physics*, **139**, 215101 (13 pages) (2013).

【国際会議などの予稿集、proceeding】

なし。

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. アミロイド前駆体タンパク質 (APP) の膜貫通領域とコレステロールとの相互作用, 宮下尚之(理研 QBiC), 小串典子(お茶の水大学), 杉田有治(理研), 2013 年 9 月, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島
2. Jaewoon Jung, "Development of GENESIS for large scale molecular dynamics simulation", Workshop on Molecular Simulations of Biophysics and Biochemistry, Nov. 21, Kobe
3. Jaewoon Jung, "Development of GENESIS for large scale molecular dynamics simulation", CMSI International Satellite Meeting 2013 in Nagoya, Oct. 17-19, Nagoya
4. Y. Matsunaga "Sequential data assimilation of single-molecule FRET photon-counting data by using molecular dynamics simulations", Workshop on Molecular Simulations of Biophysics and Biochemistry, Kobe, Japan, 2013/11/21 (招待・依頼講演)
5. Y. Matsunaga "Finding Conformational Transition Pathways in Biomolecules with the String Method and Sequential Data Assimilation", Rare Event Sampling and Related Topics I, Tokyo, Japan, 2014/03/4-5 (招待・依頼講演)

【その他】

1. 安藤格士、Edmond Show, Yousef Sadd, and Jeffrey Skolnick, "Krylov subspace methods for computing hydrodynamic interactions in Brownian dynamics simulations", 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都、2013/10/30 (ポスター発表)
2. 安藤格士、Edmond Show, Yousef Sadd, and Jeffrey Skolnick, "Krylov subspace methods for computing hydrodynamic interactions in Brownian dynamics simulations", Workshop on Modelling Biomolecular Systems in Cellular Environments, 京都、2013/10/31-11/1 (ポスター発表)
3. 安藤格士、Edmond Show, Yousef Sadd, and Jeffrey Skolnick, "Krylov subspace methods for computing hydrodynamic interactions in Brownian dynamics simulations", AICS symposium, 神戸、

平成 25 年度 RICC 利用報告書

2013/12/2 (ポスター発表)

4. The Structure of Amyloid Precursor Protein in The Membrane and The Development of Replica-exchange Interface Program (REIN), Naoyuki Miyashita, Yuji Sugita (RIKEN QBiC, RIKEN AICS), Yuji Sugita (RIKEN), 2013 年 5 月, Membrane protein folding meeting, Seoul, Korea (ポスター発表)
5. The Interaction Between Transmembrane Region of Amyloid Precursor Protein (APP) and Cholesterols, Naoyuki Miyashita (RIKEN QBiC), Fumiko Ogushi (Ochanomizu University), Yugi Sugita (RIKEN), 2013 年 11 月, ICMS2013 (3rd International Conference on Molecular Simulation), Kobe, Japan (ポスター発表)
6. The Simulation Study of the Interaction between Transmembrane Region of Amyloid Precursor Proteinj and Cholesterols, Naoyuki Miyashita (RIKEN QBiC), Fumiko Ogushi (Ochanomizu University), Yuji Sugita (RIKEN), 2013 年 12 月, 4th AICS International Symposium, Kobe, Japan (ポスター発表)
7. R. Galvelis, Y. Sugita, "Metadynamics: Implementation in GENESIS and Demonstration of Efficient Simulations", 51th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, 28–30 Oct 2013, Kyoto, Japan (ポスター発表)
8. 小林千草、小池亮太郎、太田元規、杉田有治、"Conformational changes of SERCA upon dissociation of ligand analyzed with Motion Tree method", Membrane protein folding meeting, Korea, 2013/5/20 (ポスター発表)
9. 小林千草、小池亮太郎、太田元規、杉田有治、"Motion Tree 法を用いた SERCA のリガンド解離における構造変化の解析", 第 13 回日本蛋白質科学会年会, 鳥取、2013/6/12 (ポスター発表)
10. 小林千草、杉田有治、"Conformational change of SERCA upon alternating protonation states in Ca<sup>2+</sup>-binding site", 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都、2013/10/30 (ポスター発表)
11. 小林千草、杉田有治、"Conformational change of SERCA upon alternating protonation states in Ca<sup>2+</sup>-binding site", Workshop on Modelling Biomolecular Systems in Cellular Environments, 京都、2013/10/31-11/1 (ポスター発表)
12. 小林千草、杉田有治、"Conformational change of SERCA upon alternating protonation states in Ca<sup>2+</sup>-binding site", ICMS 2013, 神戸、2013/11/20 (ポスター発表)
13. 小林千草、杉田有治、"Conformational change of SERCA upon alternating protonation states in Ca<sup>2+</sup>-binding site", AICS symposium, 神戸、2013/12/2 (ポスター発表)
14. Jaewoon Jung, Takaharu Mori, and Yuji Sugita, "Midpoint cell method for hybrid (MPI+OPENMP) parallelization of Molecular Dynamics", The 4<sup>th</sup> AICS International Symposium, Dec. 2-3, Kobe (ポスター発表)
15. Yuji Sugita, Ryuhei Harada, Isseki Yu, Takaharu Mori, Jaewoon Jung, and Michael Feig, "Biomolecular Simulations under Cellular Crowding Environment", ICMS 2013, Nov. 18-20, Kobe (ポスター発表)
16. Jaewoon Jung, Takaharu Mori, and Yuji Sugita, "Midpoint cell method for hybrid (MPI+OPENMP) parallelization of Molecular Dynamics", ICMS 2013, Nov. 18-20, Kobe (ポスター発表)
17. Isseki Yu, Takaharu Mori, Jaewoon Jung, Ryuhei Harada, Yuji Sugita, and Michael Feig, "All-atom Modelling and Molecular Dynamics Simulation of the Cytoplasm of Mycoplasma Genetalium", ICMS 2013, Nov. 18-20, Kobe (ポスター発表)
18. Jaewoon Jung, Takaharu Mori, and Yuji Sugita, "Efficient Lookup Table using a Linear Function of Inverse Distance Squared", The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Oct. 28-30,



平成 25 年度 RICC 利用報告書

Kyoto (ポスター発表)

19. Isseki Yu, Takaharu Mori, Jaewoon Jung, Ryuhei Harada, Yuji Sugita, and Michael Feig, "All-Atom Molecular Dynamics Simulation of Bacterial Cytoplasm", The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Oct. 28-30, Kyoto (ポスター発表)
20. Takaharu Mori, Jaewoon Jung, and Yuji Sugita, "Acceleration of lipid lateral diffusion by generalized-ensemble molecular dynamics simulation", The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Oct. 28-30, Kyoto (ポスター発表)
21. Jaewoon Jung, "Development of GENESIS for large scale molecular dynamics simulation", Winter school 2014, Jan. 23-24 (2014), Atagawa (招待・依頼講演)
22. 松永康佑 "生体分子シミュレーション研究の GPGPU による加速" 2013 年度理研シンポジウム「理研 RICC 新搭載 GPU と科学へのアプリケーション」 理化学研究所・和光 2013/6/27 (招待・依頼講演)
23. 松永康佑 "データ同化技術を用いた 1 分子 FRET 計測融合シミュレーションによるタンパク質動態の解明" 平成 25 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会 東京 2013/10/2-3 (口頭発表)
24. Y. Matsunaga, T. Mori, J. Jung, and Y. Sugita, "Sequential data assimilation of single-molecule FRET photon-counting data by using molecular dynamics simulations", 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都、2013/10/28 (ポスター発表)
25. Y. Matsunaga, T. Mori, J. Jung, and Y. Sugita, "Sequential data assimilation of single-molecule FRET photon-counting data by using molecular dynamics simulations", Workshop on Modeling Biomolecular Systems in Cellular Environments, 京都、2013/10/31-11/1 (ポスター発表)
26. Y. Matsunaga, T. Mori, J. Jung, and Y. Sugita, "Sequential data assimilation of single-molecule FRET photon-counting data by using molecular dynamics simulations", ICMS 2013, 神戸、2013/11/20 (ポスター発表)