

## 生体分子シミュレーション入門 Introduction to biomolecular simulation

科目コード(Course Number) 10SPS014

物理科学研究科 School of Physical Sciences 物理科学研究科共通 Common Subjects of Physical Sciences 物理科学研究科共通 Common Subjects of Physical Sciences

学年(Recommended Grade) 1年 2年 3年 4年 5年

1単位(credit) 後学期 2nd semester

齊藤 真司 (SAITO Shinji)

### 〔授業の概要 Outline〕

生体系の分子シミュレーションを行うために必要な知識について講義する。特に解析力学、統計力学の概要、分子動力学シミュレーションの基礎、拡張アンサンブル法など生体分子のシミュレーションを効率的に行う手法、シミュレーション結果の解析方法などについて解説する。

Basic theories and computational methods for molecular simulations for biomolecules will be introduced. For example, basic and various advanced methodologies for molecular simulations as well as fundamentals of analytical mechanics and statistical mechanics will be lectured.

### 〔到達目標 Aim〕

分子シミュレーションの手法に基づいて、生体分子の静的・動的諸性質を分子レベルで解明するための方法を学ぶ。

Based on the molecular simulation techniques, the static and dynamic properties of biomolecules are understood at the molecular level.

### 〔成績評価 Grading criteria〕

出席、レポートなどによる評価

Sufficient attendance to the lecture and a score of some reports

### 〔授業計画 Lecture plan〕

担当教員：齊藤 真司、奥村 久士

開講日：講義日程に関しては、後日連絡します。

授業計画：

生体分子動力学シミュレーションの手法、生体分子動力学シミュレーションの解析

Lecturers: Shinji Saito, Hisashi Okumura

Schedule: Detailed scheduled will be announced later

Contents:

Method of biomolecular dynamics simulation by Prof. Okumura

Analysis of biomolecular dynamics simulation by Prof. Saito

### 〔実施場所 Location〕

分子科学研究所 研究棟 301室

Seminar Room #301, Research Building

### 〔使用言語 Language〕

日本語または英語

Japanese or English

### 〔教科書・参考図書 Textbooks and references〕

コンピュータ・シミュレーションの基礎 (第2版) : 分子のミクロな性質を解明するために  
岡崎進, 吉井範行 化学同人

Understanding Molecular Simulation (Second Edition)

From Algorithms to Applications

Daan Frenkel and Berend Smit

Academic Press

### 〔関連URL Related URL〕

URL:

〔上記URLの説明 Explanatory Note on above URL〕

### 〔備考・キーワード Others/Keyword〕

授業担当教員

齊藤真司 (理論化, [shinji@ims.ac.jp](mailto:shinji@ims.ac.jp))

奥村久士 (分子シミュレーション, [hokumura@ims.ac.jp](mailto:hokumura@ims.ac.jp))

Lecturer(s):

Shinji Saito ([shinji@ims.ac.jp](mailto:shinji@ims.ac.jp))

Hisashi Okumura ([hokumura@ims.ac.jp](mailto:hokumura@ims.ac.jp))