



## シラバス詳細 Detail of the syllabus

---

科目コード <b>Course Number</b>	10SPS01401
科目名 <b>Course title</b>	生体分子シミュレーション入門 Introduction to biomolecular simulation
担当教員名 <b>Course Coordinator</b>	齊藤 真司 (SAITO Shinji)、奥村 久士 (OKUMURA Hisashi)
科目区分 <b>Course Category</b>	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 <b>Recommended grade</b>	1年、2年、3年、4年、5年
開講学期 <b>Period</b>	後学期 2nd semester
単位 <b>Credit</b>	1

---

### 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 Learning objectives

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.

### 成績評価方法 Grading policy

授業参加への積極性50%、レポート50%

positive class participation: 50%, report: 50%

### 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 announced later

## 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

## 授業を担当する教員 Lecturers

齊藤真司、奥村久士  
Shinji Saito, Hisashi Okumura

## 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 (分子シミュレーション, shinji@ims.ac.jp)  
奥村久士 (分子シミュレーション, hokumura@ims.ac.jp)

Lecturer(s):  
Shinji Saito (shinji@ims.ac.jp)  
Hisashi Okumura (hokumura@ims.ac.jp)