

## 第2編 タンパク質からみる生命科学

## 2.3

分子動力学計算による  
タンパク質の機能解析

中津井 雅彦 (京都大学大学院医学研究科 助教)

計算科学的手法の一種であり、古典力学に基づいて分子の動きをシミュレーションする分子動力学 (MD) 計算について、その基礎理論と計算方法を概説する。また、タンパク質を対象とした分子動力学シミュレーションを行う上で必要となる背景知識 (特に、力場の取り扱い) や、計算手順、および解析法を紹介する。さらに、分子動力学計算の応用例として、タンパク質と低分子化合物との結合強度予測法 (MP-CAFE) および拡張サンプリングシミュレーションについて、実例を用いて紹介する。

&lt;次回の予定&gt;

2015/12/2 2.4 分子動力学計算を活用したインシリコ創薬

(広川貴次 産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 研究チーム長)

開催日時：2015年11月25日(水) 17:00 - 18:30

## 【申し込み方法】

参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

神戸大学計算科学教育センターのホームページから開催日前日までに申し込みください。詳しくはホームページをご覧ください。

[http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance\\_learning/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/)

お申込み先 [http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/entry/distance\\_learning/?id=674](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/entry/distance_learning/?id=674)

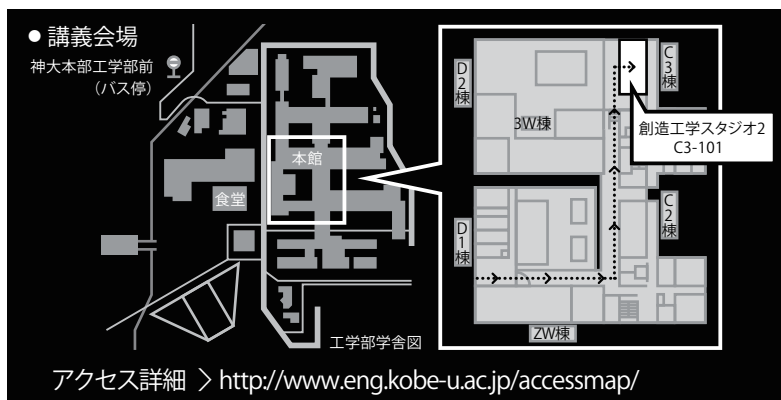
## ★神戸大学会場受講の場合

申し込みなしでも当日参加可能です。直接会場にお越しください。

会場では講師に直接質問が可能です。

## 【会場】

神戸大学工学部学舎1階 C3-101 (創造工学スタジオ2)



## &lt;講義スケジュール&gt;

## 第1編 ゲノムから見る生命科学

- 1.1 ヒトの病気はヒトの研究で～生命情報の統合によるヒト生物学と先制医療 (2015/10/14)
- 1.2 生物システムの設計：システム生物学から合成生物学へ (2015/10/21)
- 1.3 遺伝子ネットワーク解析：細胞の状態変化の過程を探る (2015/10/28)
- 1.4 到来する大規模生命情報の解析に備えて (2015/11/4)

## 第2編 タンパク質からみる生命科学

- 2.1 計算生命科学のための量子化学基礎 (2015/11/11)
- 2.2 タンパク質の量子化学計算 (2015/11/18)
- 2.3 分子動力学計算によるタンパク質の機能解析 (2015/11/25)
- 2.4 分子動力学計算を活用したインシリコ創薬 (2015/12/2)
- 2.5 QM/MM シミュレーションによるタンパク質機能解析 (2015/12/9)

## 第3編 医療・創薬における計算生命科学

- 3.1 製薬企業におけるデータ駆動型の研究開発 (2015/12/16)
- 3.2 フラグメント分子軌道法によるタンパク質-リガンド相互作用の高精度解析と創薬への応用 (2016/1/13)
- 3.3 創薬と医療のためのシミュレーション科学とビッグデータ科学 (2016/1/20)
- 3.4 創薬における計算生命科学：インフォーマティクスとシミュレーションを融合したインシリコスクリーニング (2016/1/27)
- 3.5 大規模計測と大規模計算の時代の脳科学 (2016/2/3)

詳しくはホームページでご確認ください。

主催：神戸大学計算科学教育センター

共催：神戸大学連携創造本部、理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、産業技術総合研究所 HPCI 戦略プログラム分野1 人材養成プログラム、理化学研究所 計算科学研究機構

後援：兵庫県、神戸市、公益財団法人都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西、公益財団法人計算科学振興財団