

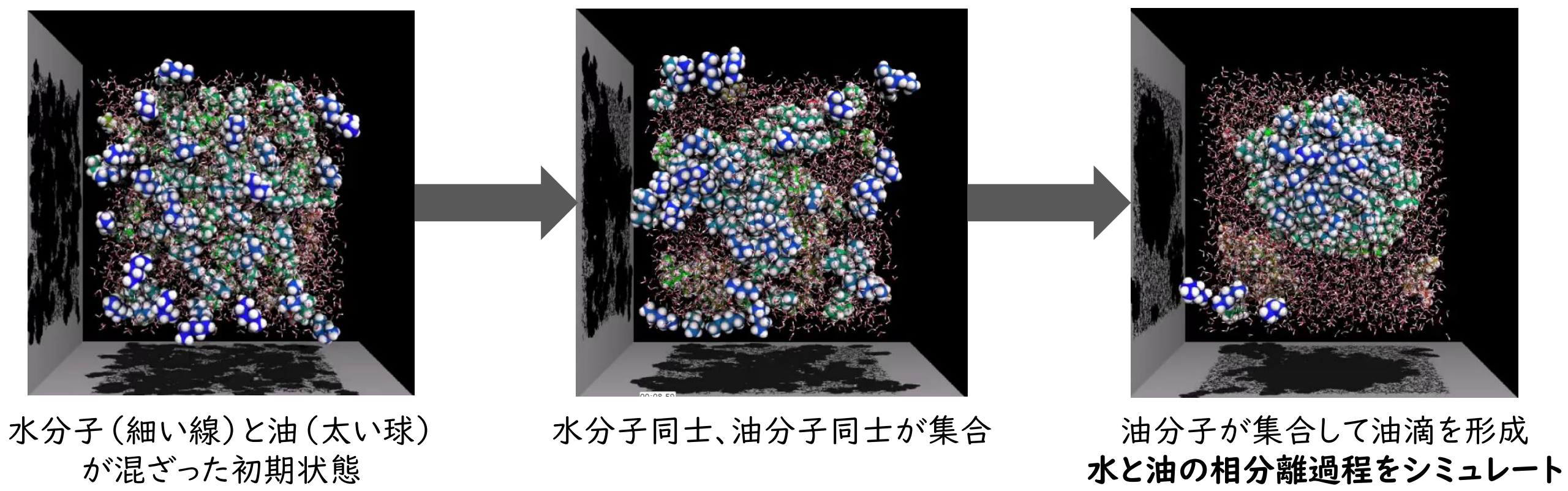
分子シミュレーションと機械学習の融合

高柳 昌芳 大学統計教員育成センター 特任准教授 (滋賀大学 データサイエンス・AIイノベーション研究推進センター准教授 クロスアポイントメント)

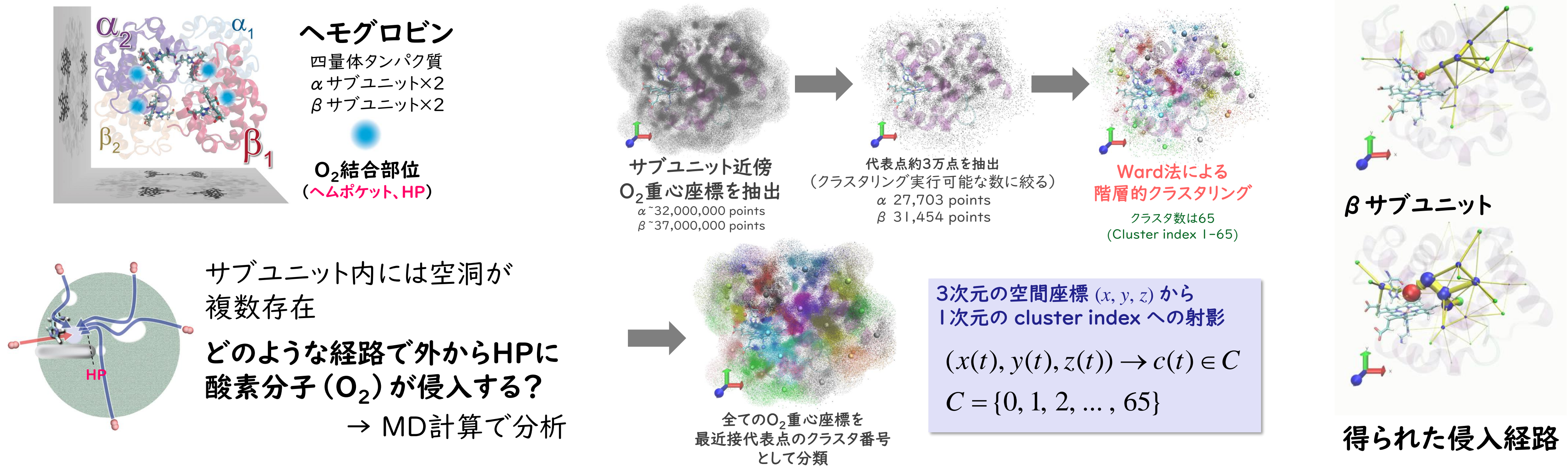
手法：分子動力学シミュレーション

各原子 (座標 $\mathbf{x}_i(t)$ 、質量 m_i) が受ける力 $\mathbf{F}_i(t)$ を ニュートンの運動方程式 (古典力学) に従って算出、各原子の運動を追跡

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_i(t)$$



ヘモグロビンヘムポケットへの酸素分子侵入経路の解明



分子配座に対するエネルギー回帰モデルの構築

