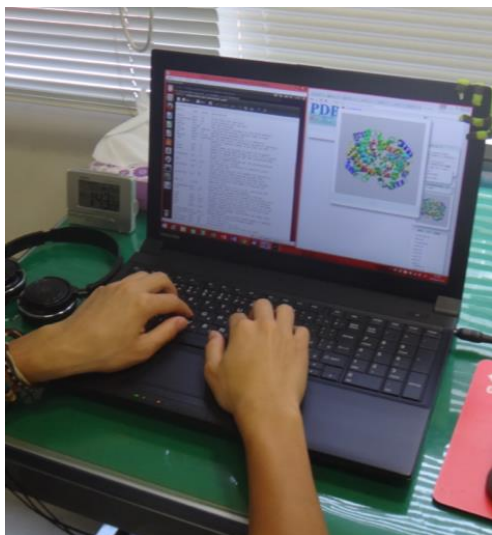


コンピュータで体内にある分子の動きをみてみよう



目標

コンピュータシミュレーションの基礎を学び、体内にある分子であるタンパク質の動きをコンピュータ上で動かしてみます。動きを可視化して、その特徴をとらえます。

学べること

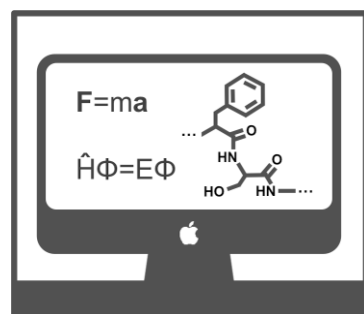
- タンパク質のシミュレーションの基礎
- シミュレーションプログラムの使い方
- データの解析と可視化

実施日・内容

- 実施は、8月の都合の良い日時
- 第1回：実施時間は、半日程度
 - タンパク質のシミュレーションの基礎の講義
 - シミュレーションプログラムを使ってみる
- 第2回：実施時間は、半日程度
 - シミュレーションの実施
 - データの解析と可視化
 - まとめ（報告書やポスターの作成）

※ 具体的な日程は、ある程度相談可能です。

※ 必要な資料はコピーして渡します。

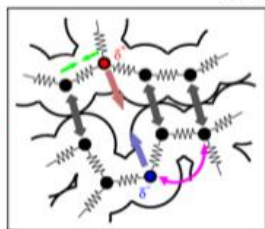


担当教員

医用情報科学専攻 鷹野 優



モデル化



原子→電気を持つ玉
化学結合→バネ

ニュートンの
運動方程式

$$m\mathbf{a}_i = m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}$$

