

第306回化学コロキウム

日時： 2020年12月15日(火) 16:30~18:00

方法： Zoom によるオンライン開催(事前に URL をお知らせします)

講師： 藤崎 弘士氏 (日本医科大学・教授)

題目： 生体分子のパスサンプリング

要旨： タンパク質の構造変化は非常にゆっくりと起こる稀な現象(レアイベント)であり、通常の分子動力学計算では、その構造変化を記述するパスのアンサンブルを得ることが難しい。化学物理、生物物理の分野では、レアイベントのパスサンプリングを効率よく行うための様々なアルゴリズムが開発されてきているが、そのなかでも超並列計算に適しているアプローチとして、われわれは(on-the-fly) string 法、Onsager-Machlup 法、重み付きアンサンブル法の開発や実装に取り組んでいる。本講演では、パスサーチやパスサンプリングの原理的技術的な側面と、非平衡物理との関連を議論する予定である。

連絡先：理学研究科・化学専攻 好村滋行(komura@tmu.ac.jp)