

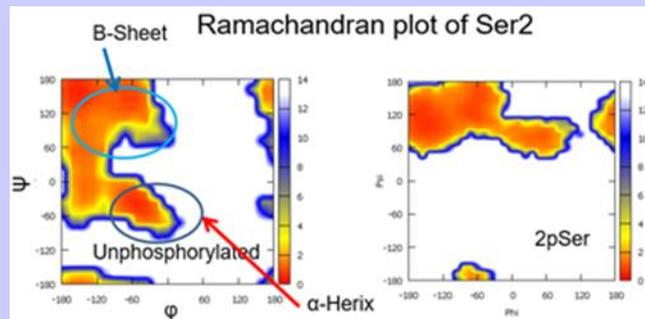
生体高分子シミュレーションコア

(教授・米澤康滋, yonezawa-wk@waka.kindai.ac.jp)

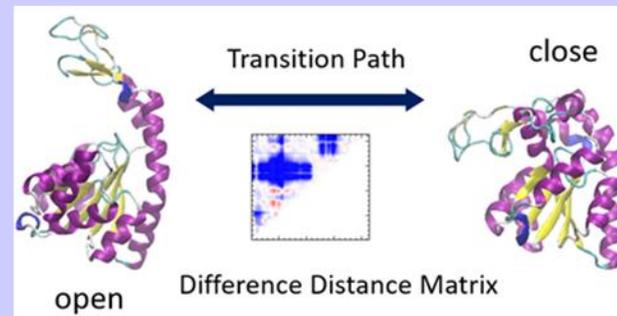
Research Area

1. 分子動力学シミュレーションによるタンパク質・核酸分子の分子機能解明
2. 生体高分子の自由エネルギーを効率よく計算する新規アルゴリズムの開発
3. シミュレーションデータの深層学習による数理解析

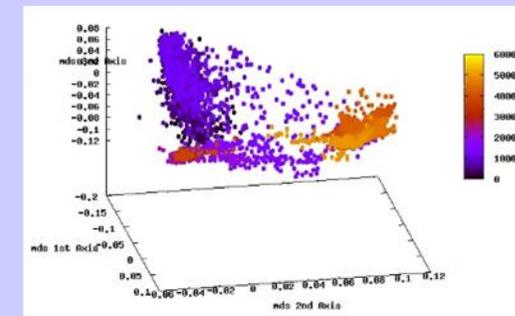
CTD のコンフォメーション空間探索



距離行列によるダイナミクス誘起



Isomap によるデータ解析



Recent Activities

- Free Energy Reconstruction from Logarithmic Mean-Force Dynamics Using Multiple Nonequilibrium Trajectories, T. Morishita, Y. Yonezawa, and A. M. Ito, J. Chem. Theory Comput., June 12, 2017
- A Method for Predicting Protein Conformational Pathways by Using Molecular Dynamics Simulations Guided by Difference Distance Matrices, Y. Yonezawa, Journal of Computational Chemistry, Vol. 37, Issue 13, p1139-1146, 2016
- Molecular Dynamics Study of the Phosphorylation Effect on the Conformational States of the C-terminal Domain of RNA Polymerase II, Yonezawa Y., J. Phys. Chem., B118, 4471-4478, 2014