

2018年度の業績（物理学教室）

今年度の研究概要は以下の通りである。

1. 去年度に引き続きプロリン異性化酵素の一つである PIN1 の遷移状態について調べている。森次圭氏（横浜市大）とともに、重み付きアンサンブル法の計算や反応座標に沿った拡散係数の計算などもしており、現在計算のチェックを行っている（藤崎）。
2. 志賀基之氏（原研）などと共同で 2 回目となるレアイベント研究会（筑波大）を企画し、国内の若手研究者に講演を行ってもらった。拡散マップ法と重み付きアンサンブル法に関しては原著論文や解説論文としてまとめた。現在はアラニンペプチドやアデニル酸キナーゼに対して拡散マップを適用することで、大域的な反応座標を抜き出すことを試みている（藤崎・菊地）。
3. 形成外科の小川令教授のグループが進めているメカノセラピーを理論・計算面で支えるために、統計力学に基づく Cellular Potts model を用いた細胞ダイナミクスの研究を小田切健太氏（専修大）とともに進めており、国内外の学会で発表した。現在は論文としてまとめており、また実験データを用いたデータ同化のスキームについて考察している（藤崎）。
4. アセチルベンゾニトリルに関して、階層モデルを用いた量子的なエネルギー移動の計算を過去に行っていたが、溶媒分子の効果は取り入れていなかった。そこで、溶媒分子も陽に取り入れた分子動力学シミュレーションを行い、どのように溶質分子から溶媒分子にエネルギーが古典的に移動するかを調べている（菊地・藤崎）。

なお、1, 2 に関しては科研費基盤 C、3 に関しては AMED-CREST の助成を受けている。

論文（査読有り）

1. [Hiroshi Fujisaki, Kei Moritsugu, Ayori Mitsutake, Hiromichi Suetani, Conformational change of a biomolecule studied by the weighted ensemble method: Use of the diffusion map method to extract reaction coordinates, J. Chem. Phys. **149** \(2018\) 134112.](#)
2. [Hiroshi Fujisaki, Kei Moritsugu, Y. Matsunaga, Exploring Configuration Space and Path Space of Biomolecules Using Enhanced Sampling Techniques --- Searching for Mechanisms and Kinetics of Biomolecular Functions, Int. J. Mol. Sci. **19** \(2018\) 3177. \(19 pages, Invited review paper\)](#)

紀要原稿など

1. 藤崎弘土, 生体分子の構造変化経路サンプリング (講義録), 第 12 回分子シミュレーションスクール--- 基礎から応用まで ---, 自然科学研究機構 (2018).
2. 藤崎弘土, モンテカルロ法を使った席順決めと経路の再重み付けについて, 日本医科大学基礎科学紀要 47 (2018) 1-13.

学会発表

招待講演 (Invited talk)

3. Hiroshi Fujisaki, Weighted ensemble simulations of biomolecules, 56th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okayama Univ. (Okayama), 9/15-17, 2018.
4. 藤崎弘土, 生体分子の構造変化経路サンプリング, 第 12 回分子シミュレーションスクール---基礎から応用まで---, 岡崎コンファレンスセンター 2018 年 9 月 3 日~9 月 6 日
5. 藤崎弘土, 重み付きアンサンブル法によるタンパク質ダイナミクスの計算, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「生体分子内情報伝達機構の新展開」2018 年 9 月 4 日~9 月 5 日

一般講演

1. Hiroshi Fujisaki, Weighted ensemble simulations of biomolecules: Applications to peptides and proteins, APS March Meeting 2019, Boston Convention Center, Mar. 4-8, 2019.
2. H. Kikuchi, H. Fujisaki, Applications of manifold learning techniques to protein dynamics, 56th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okayama Univ. (Okayama), 9/15-17, 2018.
3. 藤崎弘土, 森次圭, 米澤康滋, 楯真一, プロリン異性化酵素の重み付きアンサンブル法による計算とその加速, 日本物理学会 2018 年秋季大会 2018. 9. 9-12.
4. 小田切健太, 藤崎弘土, 機械的刺激の効果を考慮した創傷治癒の数理モデル II, 日本物理学会 2018 年秋季大会 2018. 9. 9-12.
5. 菊地浩人, 藤崎弘土, 溶液中のアセチルベンゾニトリルにおけるエネルギー移動: 非平衡 MD による計算, 日本物理学会 2018 年秋季大会 2018. 9. 9-12.
6. H. Fujisaki, K. Moritsugu, A. Mitsutake, Y. Matsunaga, H. Suetani, Weighted ensemble simulations of biomolecules, 11th European Conference on Mathematical and Theoretical Biology, Lisbon, July 23 - 27, 2018.

7. K. Odagiri, H. Fujisaki, Mathematical model for wound healing caused by exogeneous mechanical forces, 11th European Conference on Mathematical and Theoretical Biology, Lisbon, July 23 - 27, 2018.

研究会主催

藤崎弘土, 第2回ワークショップ「レアイベントの計算科学」、志賀基之博士（原研）らとの共同主催、筑波大学計算科学研究センター 1F ワークショップ室 2018.12.1.

<https://sites.google.com/view/rareeventsworkshop2018/>

科研費受領状況

革新的先端研究開発支援事業「メカノバイオロジー機構の解明による革新的医療機器及び医療技術の創出」周期的圧刺激によって制御される血管新生のシグナル伝達機構の解明 — 非接触超音波を用いた創傷治療法の開発を目指して—, 2017~2021 年度（研究代表者：小川令、研究分担者：藤崎弘土、他 3 名）

科学研究費補助金 基盤研究(C) 特設分野「遷移状態制御」

酵素反応のボトルネックを探る：反応経路サンプリングによる計算 と実験による検証（課題番号 17KT0101）、2017~2019 年度（研究代表者：藤崎弘土、研究分担者：楯真一、山本典史）

科学研究費補助金 基盤研究(C)

動的データに内在するレアイベント性の新規な特徴付けと生体時系列への応用（課題番号 16K00059）、2016~2018 年度（研究代表者：藤崎弘土、研究分担者：末谷大道）

社会活動など

藤崎弘土 統計数理研究所 情報システム研究機構 客員准教授(2015 年 4 月 ~ 2017 年 3 月)

藤崎弘土 日本物理学会 学会誌編集委員(2016 年 4 月 ~ 2019 年 3 月)

藤崎弘土 日本生物物理学会 分野別専門委員(2016 年 4 月 ~ 2017 年 3 月)

藤崎弘土 PLoS ONE Editorial Board (2018 年 9 月~)