

2019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を行い、遷移状態付近での水素結合の組み替えダイナミクスなどを特徴づけた。またアデニル酸キナーゼの動的な遷移状態も重み付きアンサンブル法で調べている。
2. 志賀基之氏（原研）などと共同で 3 回目となるレアイベント研究会（愛知県産業労働センター）を企画し、国内の若手研究者に講演を行ってもらった。
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、細胞ダイナミクスのモデル化を行っている。今年度から統計力学的なモデルだけでなく、連続体を使ったモデルの計算にも挑戦している。
4. 分子内のエネルギー移動に関しては、ポルフィリンの階層モデル計算を行い、現在論文を投稿中である。またチトクロム c のエネルギー移動に関しても非平衡 MD をやり直している。

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, Kiyoshi Yagi, Yong Zhang, John E. Straub, Molecular tier model calculations of porphyrin ligated to imidazole: A case study for quantum and classical dynamics, submitted.

紀要原稿など

1. 松永康佑, 森次圭, 藤崎弘士, タンパク質の構造変化をどのように記述するか --- 生体分子におけるパスサンプリング手法の発展, 日本物理学会誌, 投稿中
2. 藤崎弘士, 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 (2019).
3. 藤崎弘士, 医科大学における人工知能教育について, 日本医科大学基礎科学紀要 48 (2019) 21-38.
4. 藤崎弘士, 新任教授特別講演「生命現象へのマルチスケール的なアプローチについて」, 日本医科大学医学会雑誌 15 巻 (2019) 4 号 p.219.

学会発表

招待講演 (Invited talk)

5. Hiroshi Fujisaki, Weighted ensemble simulations of biomolecules, Workshop: Data analysis and machine learning in dynamical systems (Univ. of Tokyo), 27-29 May, 2019. <https://sites.google.com/view/damldynsys/>
6. 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 2019 年 9 月 2-5 日 <https://ceportal.ims.ac.jp/msschool2019/>
7. Hiroshi Fujisaki, Path sampling for biomolecules and the Onsager-Machlup action, Kanazawa Univ. Seminar hosted by Prof. Shinichi Miura, 25 March 2019. **Cancelled due to COVID-19.**

一般講演

1. 藤崎弘土, 森次圭, 松永康佑, 重み付きアンサンブル法を用いたタンパク質の構造変化とキネティックスの計算, 日本物理学会 2019 年秋季大会 9 月 10-13 日
2. 菊地浩人, 藤崎弘土, 分子動力学を用いたアセチルベンズニトリルからクロロフォルム溶媒へのエネルギー移動の計算, 日本物理学会 2019 年秋季大会 9 月 10-13 日
3. N. Yamamoto, K. Moritsugu, Y. Yonezawa, S. Tate, H. Fujisaki, Weighted ensemble simulation of the cis-trans isomerization in Pin1 enzyme using the QM/MM method, 第 57 回日本生物物理学会年会 2019 年 9 月 24-26 日 (宮崎県シーガイアコンベンションセンター)
4. H. Kikuchi, A. Mitsutake, H. Fujisaki, Applications of a diffusion map method to protein dynamics, 第 57 回日本生物物理学会年会 2019 年 9 月 24-26 日 (宮崎県シーガイアコンベンションセンター)
5. 藤崎弘土, 森次圭, 松永康佑, 重み付きアンサンブル法による生体分子の構造変化ダイナミクスの計算, 第 33 回分子シミュレーション学会, 名古屋市公会堂 4F ホール 2019 年 12 月 9 日~12 月 11 日
6. 森次圭, 山本典史, 米澤康滋, 楯真一, 藤崎弘土, 重み付きアンサンブル法による Pin1 異性化のパスサンプリング, 日本物理学会 第 75 回年次大会 2020 年 3 月 16-19 日. **Cancelled due to COVID-19.**
7. 小田切健太, 藤崎弘土, 細胞に加わる力を考慮した創傷治癒過程のモデル化, 日本物理学会 第 75 回年次大会 2020 年 3 月 16-19 日. **Cancelled due to COVID-19.**

研究会主催

藤崎弘土, 第3回ワークショップ「レアイベントの計算科学」、伊藤篤史博士（核融合研）らとの共同主催、ウインクあいち(愛知県産業労働センター) 12階 1209号室 2019年12月8日 <https://sites.google.com/view/rareeventsworkshop2019/>

藤崎弘土, (統計物理・非線形物理)と(逆問題・機械学習)の間, 伊庭幸人教授(統計数理研)らとの共同主催, <https://sites.google.com/view/ken2020feb/> **Cancelled due to COVID-19.**

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、森次圭)

科学研究費補助金 基盤研究(C)

機械学習で議事録を分析:PBL チュートリアルチューター支援システムの開発(課題番号 19K10545), 2019-2022年度(研究代表者:早坂明哲、研究分担者:藤崎弘土、他4人)

科学研究費補助金 基盤研究(C)

リアルタイムイメージングから構築するがん細胞動態の高精度予測モデル(課題番号 19K12207), 2019-2022年度(研究代表者:小田切健太、研究分担者:藤崎弘土、他1人)

社会活動など

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

藤崎弘土, 高柳慎一氏博士論文審査(2020年1月27日, 2019年11月14日に予備審査)

藤崎弘土, 日本物理学会 第75回年次大会 座長

藤崎弘土, 第33回分子シミュレーション学会 座長