

8月7日

「分子動力学シミュレーション入門と体験」報告書

報告者：安井恭一郎

【企画者】

- ・加藤 賢（工学研究科 有機・高分子科学専攻 博士前期課程2年）
- ・袴田 彩仁（理学研究科 理学専攻 物質・生命化学領域 博士前期課程2年）
- ・村上 凜太郎（理学研究科 理学専攻 物質・生命化学領域 博士前期課程2年）
- ・目黒 瑛暉（理学研究科 理学専攻 生命理学領域 博士前期課程2年）
- ・安井 恭一郎（理学研究科 理学専攻 物質・生命化学領域 博士前期課程2年）
- ・木下 裕史（理学研究科 理学専攻 物質・生命化学領域 博士後期課程1年）
- ・黒田 琉奈（理学研究科 理学専攻 物質・生命化学領域 博士後期課程1年）
- ・伊藤 正子（理学研究科 理学専攻 物質・生命化学領域 博士後期課程2年）

【企画の概要】

本企画では分子動力学（Molecular Dynamics: MD）シミュレーションに関する入門編として、初学者から中級者を対象に実施した。MDの基本原則を学ぶ講義、実際にMDシミュレーションを体験する実習、講師による応用研究の紹介の三部構成により、融合研究を考える上での選択肢を拡大する機会を提供した。

【開催の背景と目的】

MDシミュレーションは分子の運動をNewton方程式などによってコンピュータ上で再現し、化学反応中における微視的な現象の理解に寄与することから、21世紀に入って以降その利用が急速に拡大している（図1）。このため、融合研究を標榜するGTR生には自身の研究の幅を広げることはもちろんのこと、QE1, QE2 やリトリート合宿における異分野融合コンテストといったような融合研究を提案する機会においても有効な選択肢となることが期待される。

一方でGoogleフォームを用いてGTR生を対象に実施したアンケートによれば、回答者の8割がMDシミュレーションを自身の研究に応用したいと考えている一方、実際に使用したことがあると答えた者は2割強にとどまっていた。さらに「具体的に何ができるか知り

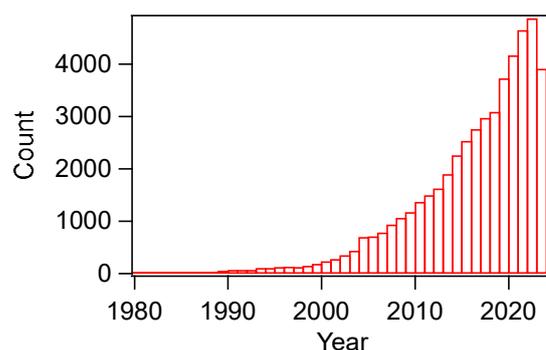


Fig. 1 Pub Med®上の”MD simulation”を含む論文数の推移

たい・初学者へのチュートリアルが欲しい」といった声も多く寄せられ、MDシミュレーションの理論的背景や実装方法に対する理解不足が研究への導入の障壁となっているという結果が得られた。加えて、代表的な理論計算である量子化学計算(Gaussian など)は講義や過去の院生企画など、知識を身につける機会が多く提供されている。一方、今回我々が取り上げるMDシミュレーションについては、学習機会があまり提供されていない。

そこで本企画ではMDシミュレーションに関して基礎となるNewton方程式から計算理論を学ぶ講義、講義をもとに実際にMDシミュレーションを動かして体験する実習、講師によるMDシミュレーションの応用研究紹介の三部構成によって知識のインプットとアウトプットを並列し、MDシミュレーションの入門部分を担うことによって融合研究に利用する心理的・技術的ハードルを下げ、融合研究を提案する上での新たな視点を提供することを目指した。

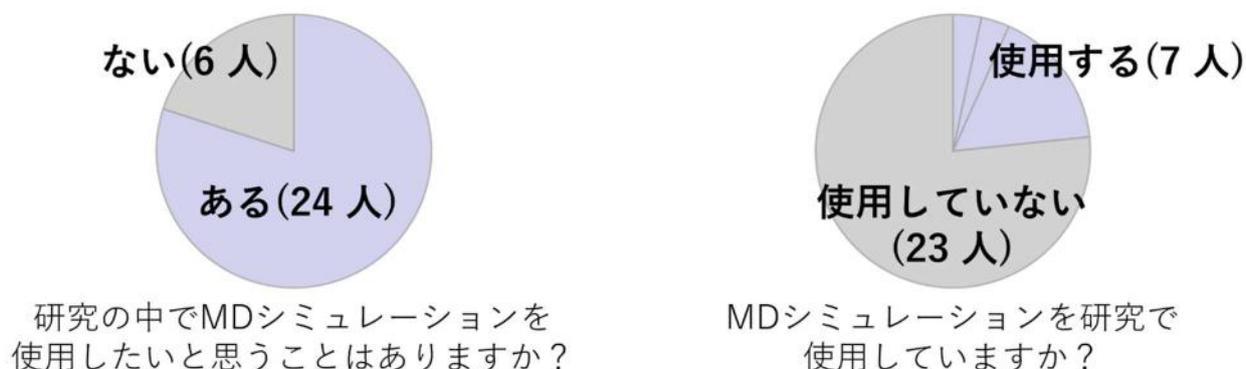


Fig. 2 Google フォームを用いた事前アンケートの結果。右図の「使用する」と答えた人の内訳は使用しないが過去に使用したことがある(5人)、時々使用する(1人)、よく使用する(1人)

【開催内容】

開催日時 2025年7月8日(火) 10:30~16:30
開催場所 名古屋大学 ITbM 1F レクチャールーム
講師 奥村久士 先生 自然科学研究機構 分子科学研究所 生命創成探究センター 准教授
参加者 GTR 生 33名

本企画では講師として分子科学研究所の奥村久士先生をお招きし、本研究の項目すべてにおいてご講演やご指導いただいた。奥村先生はMDシミュレーションの開発とその応用に取り組みされており、タンパク質の温度・圧力変性や誤った折りたたみによる「フォールディング病」の解析など、生体分子の挙動を計算科学的に探る研究を展開されている。

実習パートでは、名古屋大学が運用するスーパーコンピュータ「不老」を用いたMDシ

ミュレーションを行ったため、開催に先立ち、SSH 接続の事前準備会を7月3日（木）に実施した。

本企画の流れ

7月3日

13:00~ SSH 接続事前準備会

7月8日

10:30~12:00 MD シミュレーションの基礎理論に関する講義

13:00~15:00 〃

15:00~16:00 奥村先生による研究紹介

16:00~16:30 MD シミュレーション実践実習



GTR
Transformative Chem-Bio Research
Nagoya University

名古屋大学 卓越大学院プログラム
トランスフォーマティブ
化学生命融合研究大学院プログラム

次世代講義 (院生企画)
**分子動力学シミュレーション
入門と体験**



奥村 久士 准教授

自然科学研究機構
分子科学研究所
生命創成探究センター

日付	2025年 7月 8日 (火)
時間	10:30-16:30
場所	ITbM 1F レクチャールーム
言語	日本語

※本講義では受講者のパソコンを介してスーパーコンピュータを使用します。事前準備を7月3日13時にITbM3階セミナールームで行うので、希望者をご参加ください。

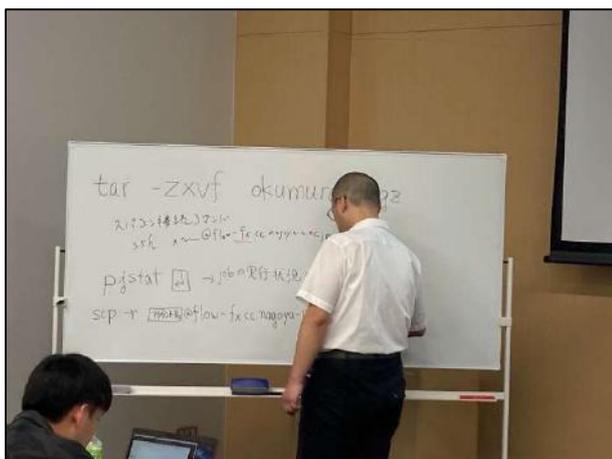
参加登録



Google Form URL:
<https://forms.gle/nmWNDzgYkcyWRFSA8>

連絡先: inseikikakumd@gmail.com

【当日の様子・学んだこと】

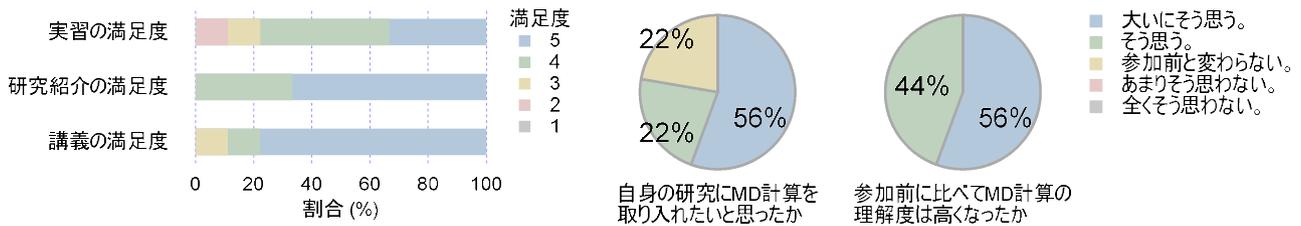


講義は昼休憩を挟んで行われ、『1. 生体分子動力学シミュレーションの基礎』『2. 解析力学に基づいた分子動力学シミュレーション』『3. 温度・圧力の制御』の3章構成で行われた。第一章では2体問題の運動方程式から始まり、リープフロッグ法や速度ベルレ法などの時間発展計算を学んだ。第二章ではラグランジュ形式およびハミルトン形式に基づく運動方程式の導出と、エネルギー保存性に優れたシンプレクティック性について解説があった。3.では能勢・Hoover 熱浴や能勢・Andersen の方法などを学んだ。

奥村先生の研究紹介では奥村先生の学生時代の話を中心にお話しいただいた他、タンパク質のフォールディングに関する MD シミュレーションなどの奥村先生の研究紹介をしていただいた。

実線実習では参加者が各自の PC から不老に接続し、奥村先生にご用意いただいたプログラムに沿って MD シミュレーションを実行した。計算結果は各自のパソコンにインストールした VMD を用いて可視化した。

【成果】



以上に本企画実施後に実施したアンケートの結果を示す。講義および研究紹介に関する満足度は非常に高く、回答者のほぼ全員が「満足度 5」または「満足度 4」と評価しており、企画内容への高い評価が得られた。一方、実習に関する満足度は、講義・研究紹介と比較してやや低めの傾向が見られた。

実習に関して寄せられたコメントには、以下のような意見があった：

- 「実習はコードを入力し、結果が出力されただけで、自分で MD シミュレーションをしたという感覚はあまりありませんでした。」
- 「蛋白構造を見て終わりであったのは、pymol でファイルを開くのとあまり変わらなかった。」

これらの意見は、実習形式が奥村先生にご用意いただいたプログラムを用いて、コマンド入力を中心に進行したことに起因していると考えられる。そのため、参加者が「自ら MD シミュレーションを動かしている」という実感を得にくかった可能性がある。

しかしながら、本企画は MD シミュレーションの初学者を対象とした入門編として位置づけられており、高校物理で扱うような基礎的な内容から段階的に学習を進める構成となっていた。1日完結型の企画であることを踏まえると、物理学の基礎から実践までを網羅する中で、実習において複雑な作業を扱うことは現実的に困難であった。

本企画はあくまで「MD シミュレーションを学び始めるきっかけ」を提供することを目的としており、より発展的な内容を希望する参加者には、講義中に紹介された奥村先生の講義動画などを活用し、さらに深い学習へと展開していただきたい。

本企画を通じて、MD シミュレーションに対する理解度が向上したかを問うアンケート項目に対しては、「大いにそう思う」「そう思う」との肯定的な回答が大多数を占めた。これにより、本企画が参加者の理解促進に十分寄与したことが確認された。また、「自身の研究に MD シミュレーションを取り入れたいか」という問いに対しては、78%が肯定的に回答しており、研究テーマの違いはあるものの、将来的な融合研究の選択肢を広げる契機となったことがうかがえる。

【謝辞】

本企画の実施にあたり、限られた時間の中でご協力いただき、講義・実習・研究紹介を通じて企画を充実したものと導いてくださった分子科学研究所の奥村久士先生に、心より感謝申し上げます。奥村先生のご講演では、分子動力学（MD）シミュレーションの理論的背景から応用研究に至るまで、体系的かつ実践的な内容をご紹介いただき、参加者がMDシミュレーションへの理解を深める貴重な機会となりました。特に、解析力学に基づく運動方程式の解説や、温度・圧力制御の手法、さらには生体分子を対象としたシミュレーションの実習は、初学者にとっても実践的な学びの場となり、参加者からも高い評価が寄せられました。

加えて、本企画の実施にあたり、計算資源の提供および技術的な支援を通じて円滑なシミュレーション環境を整えてくださった情報連携推進本部の皆様にも、深く感謝申し上げます。特に、事前の環境設定やトラブル対応など、細やかなご配慮と迅速な対応により、参加者が安心して計算実習に取り組むことができました。高性能計算環境の安定した運用が、本企画の成功に欠かせない要素であったことを改めて強調させていただきます。

また、本企画は名古屋大学卓越大学院プログラム「トランスフォーマティブ化学生命融合研究大学院プログラム（GTR）」の支援のもと実施されました。異分野融合研究の推進を理念とするGTRの枠組みにおいて、本企画が参加者の研究視野を広げ、MDシミュレーションを新たな研究手法として取り入れる契機となったことを嬉しく思います。企画段階からご支援いただいたGTRプログラム参画教員の皆様、並びにGTR学生支援室の皆様に、企画者一同、深く感謝申し上げます。

今回の学びを通じて、参加者が自身の研究にMDシミュレーションを活用し、今後の融合研究の深化と新たな共同研究の創出につながることを願っております。改めまして、本企画に関わってくださったすべての皆様に、心より御礼申し上げます。