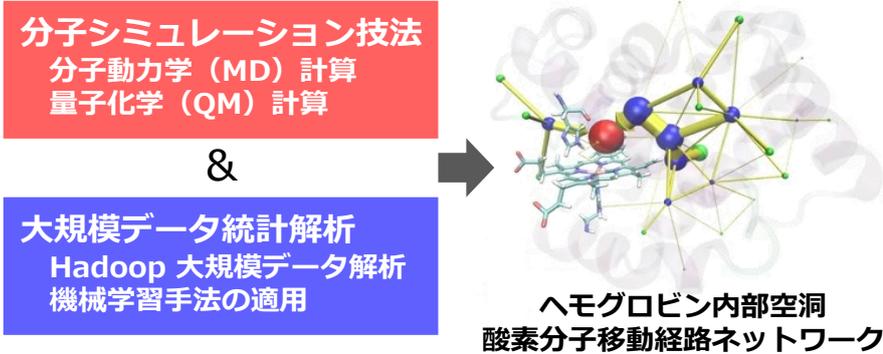


<p>データサイエンス</p>	<p>【代表的な研究テーマ】</p> <p>□ 分子シミュレーションとデータサイエンスの融合による微視的分子挙動の解析</p>
<p>key word</p>	<p>課題解決に役立つシーズの説明</p>
<ul style="list-style-type: none"> ■ 分子シミュレーション ■ 物理化学 ■ 計算化学 ■ 大規模データ解析 	<p>個々の原子の挙動をシミュレートし分子物性を微視的レベルから解明する分子シミュレーションは、タンパク質機能発現機構や分子拡散挙動の解明などの基礎科学的研究から、新規素材開発、創薬候補分子スクリーニングなどの産業応用まで幅広く用いられている。多数回の分子シミュレーション実行により得られる大規模データに対し、各種の統計処理・機械学習手法を含むデータサイエンスの手法を融合することにより、熱揺らぎ・ノイズに覆い隠されていた種々の分子挙動を解明してきた。</p>
	<p>■ 分子シミュレーション技法による生体高分子機能発現過程の解明</p> <p>生体高分子の一種であるタンパク質は、DNA の遺伝情報から転写・翻訳過程を経て合成され、生命活動の実体を担っている。その機能発現機構を理解することは、基礎科学的な面でも、そして創薬などの応用的な面からも重要である。分子シミュレーションを適用することにより、X 線結晶回折、赤外スペクトル測定などの実験的手法では観測不可能な個々の原子が示すナノメートル以下・ピコ秒以下の時空間精度での解析が可能となる。</p>
<p>高柳 昌芳 Masayoshi Takayanagi</p>	<p>タンパク質機能発現機構の一例として、赤血球中で酸素分子(O₂)運搬機能を担っているヘモグロビン(Hb)に着目した。Hb 内部にはいくつかの空洞が存在しているが、O₂ 分子がヘム鉄と結合する空洞までどのような経路で移動しているのかについては、実験観測を直接行うことは不可能であり確固たる結論は得られていなかった。そこで、数百回の分子動力学計算を実行し、平均化などの統計処理およびクラスタリングなどの機械学習手法を適用することで、Hb 内部における O₂ 移動経路ネットワークを特定した。</p>
<p>データサイエンス・AIイノベーション 研究推進センター 准教授</p>	<p>最近では、アクリルガラスとして知られるポリメタクリル酸メチルのラジカル重合過程など、高分子系に対しても解析の対象を広げている。</p>
<p>【プロフィール】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・2002 年 名古屋大学 情報文化学部 退学(飛び入学のため) ・2004 年 名古屋大学大学院 人間情報学研究科 博士課程(前期課程)修了 ・2009 年 名古屋大学大学院 情報科学研究科 博士課程(後期課程)修了 博士(情報科学) ・2009 年 名古屋大学大学院 情報科学研究科 博士研究員 ・2012 年 名古屋大学ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー 研究員 ・2013 年 名古屋大学大学院 情報科学研究科 特任助教 ・2017 年 滋賀大学データサイエンス 教育研究センター 助教 ・2019 年 滋賀大学データサイエンス 教育研究センター 准教授 ・2021 年 統計数理研究所大学統計教員 育成センター 特任准教授 ・2022 年 滋賀大学 データサイエンス AI イノベーション研究推進センター 准教授 	<p>■ Hadoop による大規模分子シミュレーションデータ解析</p> <p>多数回の分子シミュレーション実行により得られる出力データ容量は、テラバイトを超える大容量なものとなり、1台のコンピュータでは処理に長時間かかり、かつ保存することも困難となる。そこで、多数のコンピュータによる並列分散処理フレームワークである Hadoop を適用し、MapReduce アルゴリズムによる並列分散処理を活用した。</p> <p>■ 自律適応制御の技術開発</p> <p>これまでの大規模データ解析の経験を活かし、産学連携にも積極的に取り組んでいる。現在は、人間が経験と勘に基づいて行っている制御過程を自動化する自立適応制御手法の開発を行っている。</p> <div style="text-align: center;">  <p>分子シミュレーション技法 分子動力学 (MD) 計算 量子化学 (QM) 計算</p> <p>&</p> <p>大規模データ統計解析 Hadoop 大規模データ解析 機械学習手法の適用</p> <p>→</p> <p>ヘモグロビン内部空洞 酸素分子移動経路ネットワーク</p> </div>
<p>【主な社会的活動】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・所属学会 日本化学会 分子シミュレーション研究会 分子科学会 	<p>企業・自治体へのメッセージ</p> <p>データ保存は進めてそれなりの量が蓄積されているが、未だ活用に至っていないデータの有効活用を開始したいというステージに関しては、これまでの複数企業との共同研究の経験から自信をもって対応いたします。データの可視化から機械学習の適用まで様々な対応が可能です。是非ご相談ください。</p>