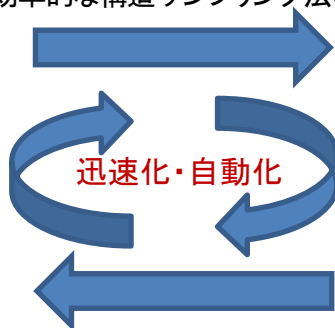


生体分子シミュレーション  
Biomolecular simulation

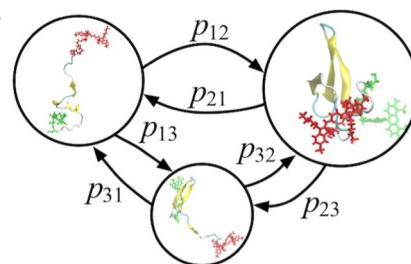
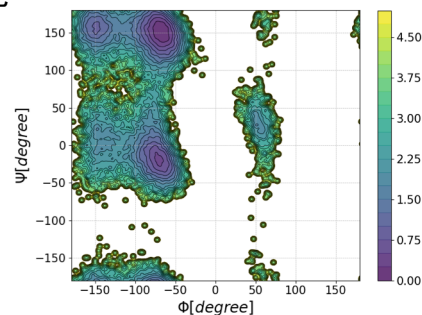
観測: 構造や安定性、運動に関するビッグデータ

- シミュレーションコードの高速化
- 効率的な構造サンプリング法の開発



仮説提案: データ解析からのフィードバック

- アミノ酸変異の提案
- 別の薬剤構造の提案



シミュレーションデータの解析・機械学習

Analysis of biomolecular simulation data