

企画協力: 日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げています。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野に大きな影響を及ぼし、知識の融合を促し研究分野のパラダイムシフトを現実のものにしています。その原動力となっているものの一つがコンピュータを活用する計算生命科学です。計算生命科学はDNAに刻み込まれたゲノム情報、タンパク質の構造情報、ヒトレベルでの健康・疾患情報などを含むビッグデータを解析・システム統合し、シミュレーションでの予測によって生命を理解し、医療分野への応用の基盤となる学際領域です。今後、データサイエンスやAI技術などの新たな科学領域や技術と組み合わせて、次世代技術・知識が創生される舞台となります。この遠隔講義は、日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会の企画協力を得て、生命科学と理工学の学際研究領域である計算生命科学に興味をお持ちの様々な方々に、その基礎と今後の展望を学んでいただき、様々な分野で基礎から応用までの研究開発を支える人材の育成を目指しています。

対象

大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者

担当講師

- 鶴田宏樹 神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/工学研究科 准教授
- 岡田随象 大阪大学大学院 医学系研究科 遺伝統計学 教授
- 白井 剛 長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授
- 川端 猛 大阪大学蛋白質研究所 寄附研究部門 准教授
- 瀬々 潤 産業技術総合研究所 人工知能研究センター機械学習研究チーム チーム長
- 平野敏行 東京大学 生産技術研究所 助教
- 福澤 薫 星薬科大学 薬学部 准教授
- 鷹野 優 広島市立大学大学院 情報学研究科 医用情報科学専攻 教授
- 池口満徳 横浜市立大学大学院 生命医科学研究科 教授
- 広川貴次 産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 研究チーム長、筑波大学 教授
- 本村陽一 産業技術総合研究所 人工知能研究センター首席研究員 兼 確率モデリング研究チーム長
- 田中佐智子 滋賀医科大学医学系研究科 社会医学講座医療統計学 准教授 兼 滋賀大学データサイエンス学部 准教授
- 水口賢司 医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト プロジェクトリーダー
- 本間光貴 理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター 制御分子設計研究チーム チームリーダー
- 田崎武信 塩野義製薬株式会社 解析センター 元センター長

遠隔インタラクティブ講義

計算生命科学の基礎IV

計算科学と生命科学の融合
基礎から医療・創薬・人工知能への応用まで

2017.10.4^水 → 2018.1.24^水

毎週水曜日 [全15回]
17:00-18:30

インターネット受講 神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信

聴講無料・事前登録制

神戸市中央区港島南町7-1-48 神戸新交通ポートライナー「京コンピュータ前駅」を降りてすぐ

共催: 神戸大学計算科学教育センター、神戸大学学術・産業イノベーション創造本部、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、理化学研究所生命システム研究センター ポスト「京」重点課題1、産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター、理化学研究所計算科学研究機構、計算科学振興財団 後援: 兵庫県、神戸市、公益財団法人都市活力研究所、NPO法人バイオグリッドセンター関西

Q 計算生命

プログラム詳細はこちら! スケジュールは裏面へ



計算生命科学の基礎IV スケジュール

10.4 [水] はじめに 計算生命科学の概要

神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/
工学研究科 准教授 鶴田 宏樹

生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げている。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野へ大きな影響を及ぼしている。その原動力となっているものの一つがコンピュータを活用する計算生命科学である。本講義では、計算生命科学を取り巻く環境と将来について理解を促しつつ、講義全体の導入紹介を行う。

第1編 ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎

10.11 [水] 遺伝統計学の基礎と応用

大阪大学大学院 医学系研究科 遺伝統計学
教授 岡田 隆象

遺伝統計学 (statistical genetics) は、遺伝情報と形質情報の関わりを統計学の観点から研究する学問分野であり、一次的に処理されたゲノム情報を適切に解釈し、社会還元するためのデータ解析学問として注目されている。大規模ヒト疾患ゲノム解析により同定された数多くの疾患感受性遺伝子の情報を、多彩な生物学・医学データベースと分野横断的に統合することにより、新たな疾患病態の解明や、疾患バイオマーカーの同定、新規ゲノム創薬、疾患疫学の謎の解明、等に貢献できると期待されている。

10.18 [水] ゲノミクスからの構造インフォマティクス

長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授 白井 剛

大規模ヒト疾患ゲノム解析により疾患関連変異の探索は極めて効率化されたが、通常その情報を疾患メカニズムから創薬などの応用へ繋げるためには、分子構造の解析が必要になる。このとき、ゲノム情報量と分子構造情報量のギャップが問題となるが、構造インフォマティクスはこのギャップを埋めるための手段である。この講義では、なるべく具体例を示しながら超分子モデリング、相互作用予測、疾患変異マッピング解析などの手法について解説する。

10.25 [水] 電子顕微鏡解析

大阪大学 蛋白質研究所 寄附研究部門 准教授 川端 猛

近年、低温電子顕微鏡の単粒子解析による3次元分子構造の解析技術が大きく進展し、X線結晶解析・NMRに並ぶ第三の構造解析技術として定着しつつある。この進歩は、電子直接検出器などのハードウェアの刷新とともに、EMAN2、Relionなど優れた画像処理プログラムの開発によるものが大きい。本講義では、単粒子解析の情報処理の各技術(2D画像分類、3D画像再構成、原子モデリング)を順に説明し、大量の2D画像データ群から高解像度の3D画像と原子モデルを推定するための計算法を概説する。

11.1 [水] 機械学習・人工知能技術入門

産業技術総合研究所 人工知能研究センター
機械学習研究チーム チーム長 瀬々 潤

生命科学から算出されるデータを解析することで、基礎面では生命の理解、応用面では医療、創薬、農学へと繋げていく期待は高い。本講義ではこれらの解析の基礎となる機械学習や数理統計技術の説明にはじまり、いわゆる人工知能の導入を行う。その上で、計算生命科学への応用に関する現状と議論を行う。

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

11.8 [水] 計算生命科学のための量子化学基礎

東京大学 生産技術研究所 助教 平野 敏行

量子化学シミュレーションは、実験化学と相補的に用いることで物性・化学反応の解明に威力を発揮する、強力な研究手法である。コンピュータの性能向上と計算手法の進歩により、これまで難しいと考えられてきた大規模生体分子の量子化学シミュレーションが実用的になりつつある。量子化学シミュレーションの理解を助ける量子化学計算理論・計算法や分子生物学の基礎から、最新のタンパク質カノニカル量子化学計算について紹介する。

11.15 [水] フラグメント分子軌道法に基づく創薬分子設計の現状と課題

星薬科大学 薬学部 准教授 福澤 薫

タンパク質の全電子計算が可能なフラグメント分子軌道(FMO)法によって、これまでになく高精度の構造ベース創薬が可能になってきている。FMO法は、新規化合物の精密な設計や合理的なリード化合物の最適化、インシリコスクリーニング、さらにはビッグデータに基づく創薬へと繋がることが期待されている。講義では産学官連携のFMO創薬コンソーシアムやスーパーコンピュータの活用など、FMO創薬の現状と課題について概説する。

11.22 [水] QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析

広島市立大学大学院 情報学研究科 医用情報科学専攻
教授 藤野 優

タンパク質は巨大かつヘテロな系であり、機能を有効に発揮できるように、その「かたち」を変化させる。タンパク質機能の理解・予測に、機能発現に関わる局所部分(活性中心)には量子力学(QM)を、活性中心を取り囲むタンパク質の「かたち」の変化には古典力学(MM)を適用したQM/MM法は極めて有効である。本講義ではQM/MM法の理論背景からはじめ、タンパク質の機能解明への応用について紹介する。

11.29 [水] 生命系の分子動力学シミュレーション

横浜市立大学大学院 生命医科学研究科 教授 池口 満徳

生体分子モーターなど、多くの生体分子は動くことで機能している。そのような生体分子の動きについて、コンピュータによって研究する方法が分子動力学シミュレーションである。本講義では、分子動力学シミュレーションの基礎から、タンパク質や核酸などの生体分子に適用した事例まで解説する。

12.6 [水] 分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター
研究チーム長・筑波大学 教授 広川 貴次

タンパク質立体構造解析技術の発展により、構造生物学データを起点とした創薬支援研究が本格的に促進されている。しかし、構造生物学データの中には、特定の条件や環境に依存した構造情報もあり、そのままのデータでは創薬へ適用が難しいものがある。分子モデリングや分子シミュレーションは、このような問題を補完できる技術として注目されている。講義では、構造生物データと創薬を橋渡しする高度なインシリコ創薬支援技術について概説する。

第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用

12.13 [水] 確率モデリング技術の基礎と応用

～ビッグデータ活用のための人工知能技術～

産業技術総合研究所 人工知能研究センター 首席研究員 兼
確率モデリング研究チーム長 本村 陽一

ビッグデータを活用する人工知能技術に大きな期待が寄せられている。実社会で生成される各種のビッグデータを活用する人工知能技術として機械学習の発展が近年爆発的な性能向上をもたらした。本講義では機械学習分野に概観と、その中で不確実な現象のモデル化に用いられる確率モデリング技術の基礎と応用について解説する。

12.20 [水] ヒトを対象とした医学研究のデザインと解析手法

滋賀医科大学 医学系研究科 社会医学講座 医療統計学 准教授
兼 滋賀大学データサイエンス学部 准教授 田中 佐智子

ヒトの健康・疾病に関連するリスク要因を探索する場合、ヒトを対象とした医学研究の実施が必要となる。本講義では、健康人10万人を追跡した大規模研究において、遺伝子・バイオマーカーなどのリスク要因を評価するための研究デザインと解析手法を紹介する。また、患者を対象とした医学研究のデザインと解析手法についてもふれ、高次脳神経機能やバイオマーカーの評価の実例を紹介する。

1.10 [水] 計算システム生物学と創薬

医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクス
プロジェクト プロジェクトリーダー 水口 賢司

コンピュータによるモデリングを実現するための基盤技術として、1) データ統合とデータベース構築、2) 機械学習を中心とする統計モデリング、3) 一般的な基本原理に基づく数理モデリング、の3つをあげることができる。特に、異なった種類のデータを統合することは各種モデリングの鍵であり、これらの概念を中心に計算システム生物学の創薬研究への応用を概観する。

1.17 [水] インフォマティクスとシミュレーションを融合したインシリコスクリーニングと最適化設計

理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター
制御分子設計研究チーム チームリーダー 本間 光貴

近年の創薬において、タンパク質-リガンド間のドッキングによるインシリコスクリーニングは無くてはならないものとなっている。また、現場の創薬ではヒットが得られた後の活性やADMETプロファイルの向上を目指した設計も重要である。本講義では、インシリコスクリーニングの精度を向上させるためのポイントについて説明するとともに、ヒットが得られた後の設計手法についてAMEDの創薬インフォマティクスシステム構築で開発中の毒性予測モデル等を含めて紹介する。

1.24 [水] Real World Data: 統計が疫学がコンピュータサイエンスが

塩野義製薬株式会社解析センター 元センター長 田崎 武信

統計学を愛するがゆえにデータマイニングを学び、統計学を愛するがゆえに機械学習を学び、そしていまは、統計学を愛するがゆえに疫学を学んでいる。いまの疫学は昔とくらべ格段にごわく、社会科学分野の「実証分析」にも応用されている。ずいぶん(数十年)前になるが、神戸大学の計測工学/システム工学で統計学を非常勤で14年間教えた。そこでは学生から多くのことを学んだ。その経験を踏まえ、医療データの解析で存在感を持ち続けている統計学を紹介したい。

参加申込

神戸大学計算科学教育センターホームページの申込フォームからお申込み下さい。本講義案内についても公開しています。

☞ http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science4/

受講方法

講義は神戸大学計算科学教育センターで行ない、インターネットを通じて中継する会議システムWebEXを使用して配信します。直接受講する以外にどこからでもオンライン受講が可能です。

問合せ

神戸大学計算科学教育センター

☎ 078-599-6720 ✉ office@eccse.kobe-u.ac.jp

