



企画協力: CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

現代の生命科学は、急速な変革を遂げつつあります。その変革の原動力は、生物の大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と、それに促された計算機科学・シミュレーション科学・人工知能学・データサイエンスなどの研究分野の緊密な連携、すなわちコンピュータを活用した計算生命科学の進歩です。計算生命科学は、ゲノムの遺伝情報・生体分子の立体構造と相互作用・細胞レベルの代謝・生理や疾患までの高次生命活動の多階層のビッグデータを定量的かつシステムティックに解析し、シミュレーションにより予測して、それらの統合により生命を理解することを目指します。その急速な発展は農学や医学の分野にも大きな影響を及ぼし、ゲノム医療などの応用も実現しつつあります。計算生命科学は、現代の生命科学の推進に不可欠な知識を提供します。この遠隔講義では、CBI学会・日本バイオインフォマティクス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持たれる方々に、その基礎と将来の展望を学んでいただき、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。

インターネット  
受講

聴講無料  
事前登録制

**[遠隔インタラクティブ講義]**

**計算科学・データサイエンスと生命科学の融合  
基礎から医療・創薬への応用まで**

# 計算生命科学の基礎V

2018 2019  
10.3 水 → 1.23 水

毎週水曜日 [全15回] 17:00-18:30

神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信

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]**

- 白井 剛 長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授
- 田中 成典 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授
- 森 一郎 神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授
- 加藤 護 国立がん研究センター研究所 バイオインフォマティクス部門 部門長
- 山西 芳裕 九州工業大学大学院情報工学研究院生命情報工学研究系 教授
- 神田 大輔 九州大学 生体防御医学研究所 教授
- 金谷 重彦 奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 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
- 福澤 薫 星薬科大学薬学部 准教授
- 松林 伸幸 大阪大学大学院基礎工学研究科化学工学領域 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
- 森 聖治 茨城大学大学院理工学研究科 教授
- 都地 昭夫 塩野義製薬株式会社 デジタルインテリジェンス部 グループ長
- 北西 由武 塩野義製薬株式会社 解析センター グループ長
- 由良 敬 お茶の水女子大学 シミュレーション科学・生命情報学教育研究センター 教授/早稲田大学先進理工学部生命医科学科 教授
- 本間 光貴 理化学研究所 生命機能科学研究センター 制御分子設計研究チーム チームリーダー
- 國澤 純 医薬基盤・健康・栄養研究所 ワクチンマテリアルプロジェクト&腸内環境システムプロジェクト プロジェクトリーダー
- 西田 知史 情報通信研究機構 脳情報通信融合研究センター 研究員

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 生命機能科学研究センター 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 計算科学研究センター、計算科学振興財団、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科 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

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 検索





# 計算生命科学の基礎V スケジュール

## 10.3 [水] はじめに 計算生命科学の概要

長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授 白井 剛  
神戸大学大学院システム情報学研究所 教授 田中 成典  
神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授 森 一郎

現代の生命科学は、大規模データ(ビッグデータ)の蓄積により大きな変貌を遂げつつある。全ゲノムや巨大生体分子構造を対象とした研究は、より包括的な生命の理解に貢献し、さらには医学や農学分野での応用への道も開きつつある。これらの改革の中心にあるのは、生命を大規模データとしてとらえ、高度な計算により解析を行う計算生命科学である。本講義では、計算生命科学の基礎から最前線の研究や応用までをカバーする「計算生命科学の基礎V」への導入として、講義シリーズ全体を概観する。

## 第1編 ゲノムから分子構造までの計算生命科学の基礎と実践

### 10.10 [水] 臨床シーケンスの実際—情報解析を中心に—

国立がん研究センター 研究所  
バイオインフォマティクス部門 部門長 加藤 謙

2018年、臨床シーケンス(がんゲノム医療)が先進医療として認定された。臨床シーケンスでは次世代シーケンサーとバイオインフォマティクス技術によって数百遺伝子にわたる変異を1回の検査で検出し、分子標的薬を決定する。本講義では、臨床シーケンスの概要、使用されるバイオインフォマティクス技術、主治医へ検査結果が返却されるまでの情報の流れ、電子カルテとの接続や最新の統計・情報技術による未来の医療の試みを紹介する。

### 10.17 [水] 機械学習によるバイオビッグデータの実践的利用

九州工業大学大学院情報工学研究科  
生命情報工学研究系 教授 山西 芳裕

近年の生命医学では、ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタゲノム、フェノーム、インタラクトームなどの大規模オミックス情報が得られるようになった。同時に、膨大な数の化合物や薬物に関する化学構造情報や生理活性情報も蓄積されている。本講義では、機械学習(人工知能AIの基礎技術)を駆使して、多様なバイオビッグデータの融合解析から生命科学や医療・創薬に繋げるアプローチについて紹介する。

### 10.24 [水] X線結晶解析・NMR・電子顕微鏡・AFMを統合した相関構造解析

九州大学 学生防衛医学研究所 教授 神田 大輔

タンパク質分子の原子レベルの立体構造に基づき、酵素などの機能発現のメカニズムが説明でき、タンパク質分子の立体構造の時間変化、すなわち動的な情報を得ることで理解を深めることができる。さらにX線結晶解析、NMR(核磁気共鳴法)、電子顕微鏡、AFM(原子間力顕微鏡)などの複数の方法を組み合わせることで、新しい知見を得ることができ、それぞれの解析手法と複数の解析手法を統合した相関構造解析について具体例を挙げながら説明する。

### 10.31 [水] 二次代謝物のデータサイエンス

奈良先端科学技術大学院大学  
先端科学技術研究所 教授 金谷 重彦

2009年、Jim Grayが「第4のパラダイム:データ集約型の科学的発見」を提唱した。第1から第3のパラダイムとは、実験を通じた仮説検証、法則を定量的に表現する方法、計算機シミュレーションである。データサイエンスとは、このような方法論を包括し、科学の分野間を横断し、現象を解明する。さらにはこれらの知見をもとに、政策決定などの意思決定にまでつなぐ方法論といえる。本講義では、二次代謝物におけるデータサイエンスについての研究の紹介と今後の課題について考察する。

[コーディネーター] 白井 剛(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)、田中 成典(神戸大学大学院システム情報学研究所 教授)、森 一郎(神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授)、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)、江口 至洋(神戸大学学術・産業イノベーション創造本部 客員教授)、渡邊 博文(神戸大学計算科学教育センター 研究員)

## 第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

### 11.7 [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所 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。

### 11.14 [水] フラグメント分子軌道法に基づく構造生命科学

星薬科大学薬学部 准教授 福澤 薫

フラグメント分子軌道(FMO)法は、生体高分子の全電子計算を高速かつ高精度に実行することができる量子化学計算手法である。X線結晶構造の理論的な解釈やそれに基づいた高精度な構造ベース創薬に活用できるため、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、FMO法に基づく最新の取り組みについて、スーパーコンピュータを活用したFMO計算結果のデータベースなども交えて紹介する。

### 11.21 [水] 溶液中における生体関連分子複合体の自由エネルギー解析

大阪大学大学院基礎工学研究科化学工学領域 教授 松林 伸幸

溶液中におけるタンパク質や脂質などの生体関連分子は、溶媒との分子間相互作用の下で構造を形成し機能を発揮する。本講義では、分子シミュレーションと溶液統計力学理論の融合に基づく生体関連分子複合体の自由エネルギー解析を概説する。統計力学と分子シミュレーションの基礎から出発して、溶媒和理論の構成について述べ、タンパク質構造に対する共溶媒効果、タンパク質複合体の安定性、および、タンパク質-脂質膜相互作用の分子レベル解析に進む。

### 11.28 [水] 分子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

クライオ電顕をはじめとするタンパク質立体構造解析技術の発展により、構造データを起点とした創薬支援研究が再び注目されてきている。しかし、構造データの中には、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。分子シミュレーションは、このような問題を補充できる技術として注目されている。講義では、構造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。

### 12.5 [水] QM/MM法の概略と応用

茨城大学大学院理工学研究所 教授 森 聖治

本講義では、2013年ノーベル化学賞受賞対象であり、反応の重要な部分に精度の高いQM法、その他の部分に計算コストの安いMM法を組み合わせたハイブリッド法である、QM/MM法の概略を説明し、化学反応系や酵素反応に対する応用について説明する。

## 第3編 健康科学・医療・創薬への応用

### 12.12 [水] 医薬品業界におけるデータサイエンティスト

塩野義製薬株式会社 デジタルインテリジェンス部  
グループ長 都地 昭夫  
塩野義製薬株式会社 解析センター グループ長 北西 由武

データサイエンティストはデータを活用するために、関連データベースや解析手法に習熟し、ビジネスの観点も加味して、仮説立案と検証を提案し、サイクルを回していく役割である。本講義では、周辺技術であるIoT、ビッグデータ活用や人工知能、シミュレーションに関する技術などの事例を交えながら医薬品業界におけるデータサイエンティストのあり方を解説する。

### 12.19 [水] さまざまな生命科学データの接続で見える新たな知見

お茶の水女子大学 シミュレーション科学・生命情報学教育研究センター  
教授/早稲田大学先進理工学部生命医科学科 教授 由良 良敬

生命科学研究における測定技術の進展は、膨大な生命科学データの蓄積をもたらした。これらのデータを利用して、新規の関係や仮説を生み出すためには、研究者の発想を支援するツールが必要である。そこで、生命科学の新たな知見(仮説)をデータに基づいて見いだすことを実現できるプラットフォームの構築に挑戦している。簡単なキーワードを入力することで、異なるデータベースを同時検索し、それらデータの関係を見いだすことができることをめざしている。

### 1.9 [水] シミュレーションとAIの融合による創薬

理化学研究所 生命機能科学研究センター  
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、インフォマティクスやシミュレーションを利用したインシリコスクリーニングはなくてはならないものとなっている。本講義では、インフォマティクスやシミュレーションの基本的な理論、創薬現場でのメリット・デメリット、最近の動向などについて事例を交えながら紹介する。また、最先端の研究として、機械学習(人工知能)的な方法や量子化学計算(FMO法)の応用などについても触れる。最後に、最近のライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)における創薬AI開発の取り組みの現状について紹介する。

### 1.16 [水] ビッグデータを活用した健康科学への挑戦

医薬基盤・健康・栄養研究所  
ワクチンマテリアルプロジェクト&腸内環境システムプロジェクト  
プロジェクトリーダー 國澤 純

近年、腸内細菌や食品が健康に与える影響が注目されている。これらの腸内環境は個人差が大きく、また生活習慣によっても変動する。本講義では私たちが行っているコホート研究から得られた「食事などの生活習慣-腸内細菌-生体内代謝物-健康に関連する生体内因子-身体状態」に関するビッグデータを活用した研究を中心に、次世代の健康科学研究に向けた挑戦を紹介したい。

### 1.23 [水] 脳情報の可視化とその応用

情報通信研究機構  
脳情報通信融合研究センター 研究員 西田 知史

ヒトの知性は脳内の情報表現により形成されている。近年の計算神経科学の発展により、視覚・聴覚・意味などの脳内情報表現を、fMRIなどによる計測脳活動から可視化することが可能になってきている。本講義では、そのような脳内情報の可視化における最新の研究成果を紹介するとともに、成果の応用として脳情報と人工知能の融合による新技術とその産業応用の可能性について解説する。

### 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\\_science5/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science5/)

### 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 ✉ls-contact@eccse.kobe-u.ac.jp

