

遠隔インタラクティブ講義 **計算生命科学の基礎 III** 生命科学と理工学の融合による生命理解と医療・創薬への応用
2016年10月4日（火）～2017年1月24日（火）毎週火曜日 17：00～18：30 全15回

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

分子シミュレーションを活用した創薬支援技術

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）

スーパーコンピュータ「京」に代表されるような大規模計算環境の発展と分子動力学計算を中心とした分子シミュレーション技術が相俟って、インシリコ創薬による開発プロセスの効率化と革新的な創薬支援が期待されている。特に、分子動力学計算は、標的タンパク質の動的構造の解析、高精度結合自由エネルギー計算、化合物作用機序解析などに活用されており、創薬支援研究に欠かせない要素技術となっている。本講義では、分子動力学計算を活用したインシリコ創薬を概説し、国内外の動向、そして実際の活用事例などを紹介する。

- <今後の予定> 2016/12/6 「ドッキングソフトの原理と実際」
福西 快文（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3D分子設計チーム 研究チーム長）
- 2016/12/13 「創薬における計算生命科学：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設計」
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 チームリーダー）

開催日時：2016年11月29日（火） 17：00-18：30

【申し込み方法】

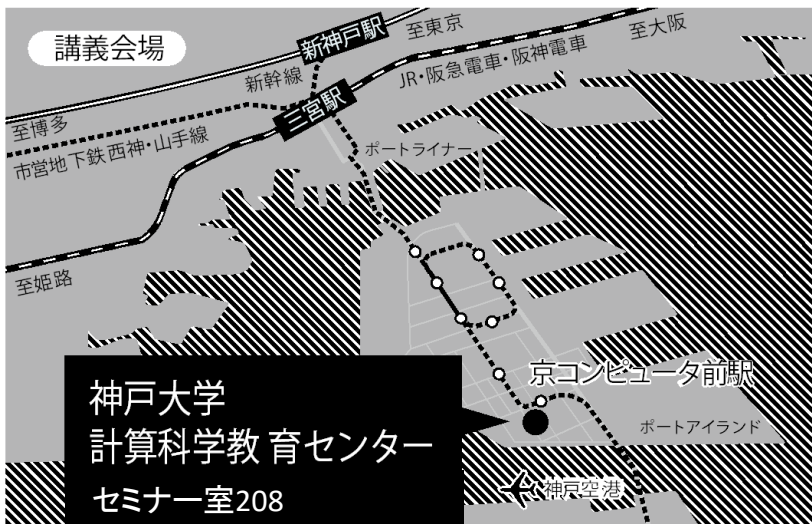
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

神戸大学計算科学教育センターのホームページから開催日前日までにお申し込みください。詳しくはホームページをご覧ください。

http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science3/

★神戸大学会場受講の場合

申し込みなしでも当日参加可能です。直接会場にお越しください。会場では講師に直接質問が可能です。



〈講義スケジュール〉

はじめに	
2016/10/4	計算生命科学のための概要
第1編 バイオインフォマティクス	
2016/10/11	ゲノムに記された遺伝ビッグデータを読むーヒトゲノム計画から大規模個人ゲノム解読時代の到来までー
2016/10/18	ゲノム情報からの生命現象・病理現象の統計解析
2016/10/25	ゲノム・タンパク質のバイオインフォマティクス入門
2016/11/1	人工知能研究と生命科学ーディープラーニングのバイオテクノロジーへの応用可能性ー
第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション	
2016/11/8	計算生命科学のための量子化学基礎」
2016/11/15	フラグメント分子軌道法の基礎と応用
2016/11/22	QM/MM法を用いたタンパク質機能解析
2016/11/29	分子シミュレーションを活用した創薬支援技術
2016/12/6	ドッキングソフトの原理と実際
第3編 計算生命科学の最前線	
2016/12/13	創薬における計算生命科学：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設計
2016/12/20	製薬企業におけるデータサイエンス
2017/1/10	計算生物学によるシステムの理解からの創薬への展開
2017/1/17	全脳アーキテクチャ・イニシアティブ：脳全体のアーキテクチャに学び人間のよ うな汎用人工知能の構築を目指す
2017/1/24	計算生命科学がもたらすものへの期待

- 【主催】 神戸大学 計算科学教育センター
【企画協力】 CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会
【共催】 神戸大学連携創造本部、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、公益財団法人計算科学振興財団
【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