

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

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)

蛋白質など受容体への低分子のドッキングソフトは、薬物探索、分子設計で核となる技術であり、過去に開発されたドッキングソフトは約50、現在は市販品数種類と無償ソフトが数種類存在する。低分子ドッキングソフトの原理を、現在、製薬企業など30社で使われている国産ソフトmyPresto/sievgeneを中心に、分子間相互作用などから紹介する。また、低分子ドッキングソフトの応用事例を紹介する。

- <今後の予定>
- 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)
 - 2016/12/20 「製薬企業におけるデータサイエンス」
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 (同 解析センター サブグループ長)

開催日時：2016年12月6日（火） 17:00-18:30

【申し込み方法】

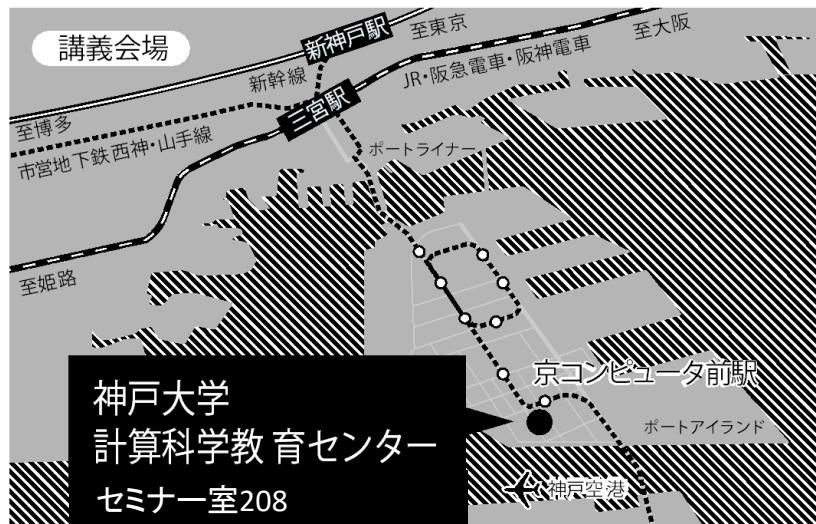
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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