

第3編 計算生命科学の最前線

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）

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開発中のものを含めて紹介する。

- <今後の予定> 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）
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」
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）

開催日時：2016年12月13日（火） 17:00-18:30

【申し込み方法】

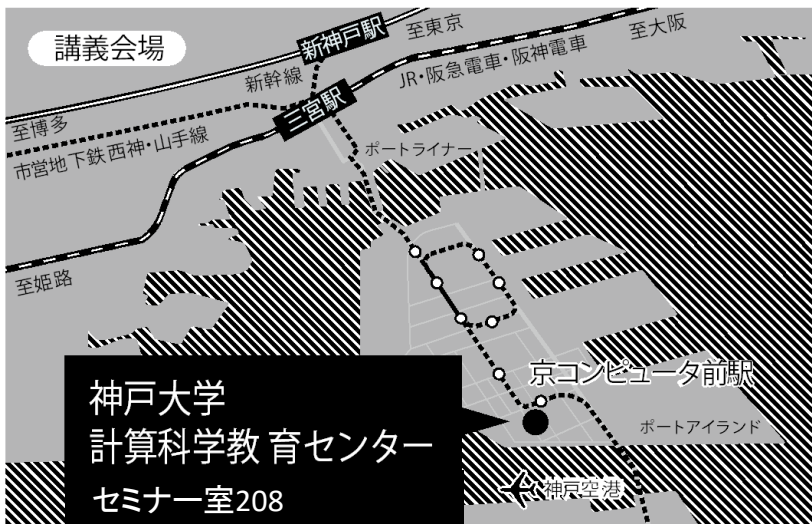
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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