

### 第3編 計算生命科学の最前線

# 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)

現在の創薬では、疾患に関わる多数の生体分子やその反応を「機能を生み出す一つのシステム」として理解し、それに基づく標的の同定や医薬品候補化合物の設計が求められている。そのために、異なった実験手法や対象からの多様なデータを統合し、生命システム全体をネットワークとして捉える計算システム生物学的アプローチについて、基礎的な方法論と具体的なプロジェクトへの応用の両面から概説する。

- <今後の予定> 2017/1/17 「全脳アーキテクチャ・アプローチ：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」  
山川 宏（ドワンゴ人工知能研究所 所長）
- 2017/1/24 「計算生命科学がもたらすものへの期待」  
宮田 満（日経BP社 医療局特命編集委員）

## 開催日時：2017年1月10日（火） 17：00-18：30

#### 【申し込み方法】

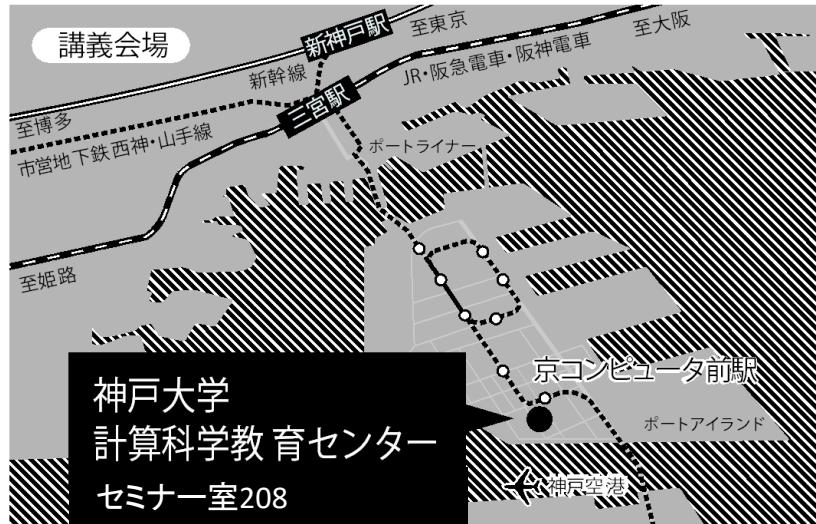
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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/](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                                   |