

第1編 ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎

# ゲノミクスからの 構造インフォマティクス

白井 剛（長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授）

大規模ヒト疾患ゲノム解析により疾患関連変異の探索は極めて効率化されたが、通常その情報を疾患メカニズムから創薬などの応用へ繋げるためには、分子構造の解析が必要になる。このとき、ゲノム情報量と分子構造情報量のギャップが問題となるが、構造インフォマティクスはこのギャップを埋めるための手段である。この講義では、なるべく具体例を示しながら超分子モデリング、相互作用予測、疾患変異マッピング解析などの手法について解説する。

- <今後の予定> 2017/10/25 「電子顕微鏡解析」  
川端 猛 大阪大学 蛋白質研究所 寄附研究部門 准教授  
2017/11/1 「機械学習・人工知能技術入門」  
瀬々 潤 産業技術総合研究所 人工知能研究センター 研究チーム長

**開催日時：2017年10月18日（水） 17：00-18：30**

【申し込み方法】

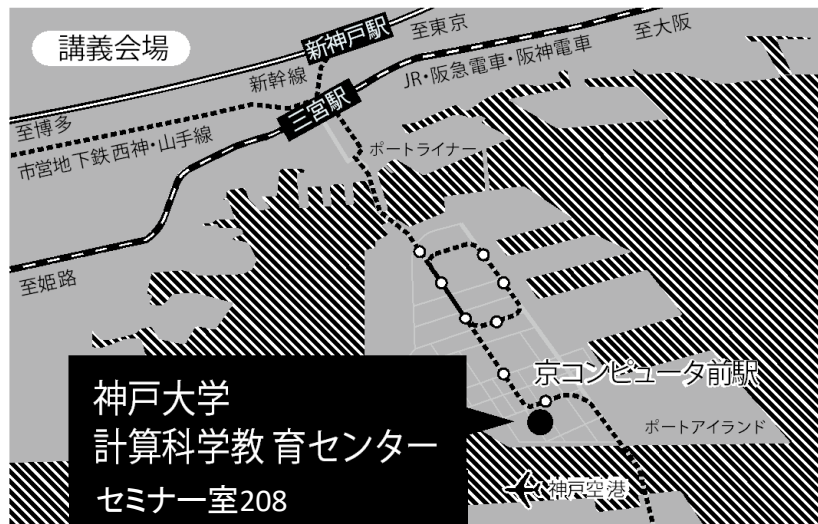
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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\\_science4/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science4/)

★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	
2017/10/4	計算生命科学の概要
第1編 ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎	
2017/10/11	遺伝統計学の基礎と応用
2017/10/18	ゲノミクスからの構造インフォマティクス
2017/10/25	電子顕微鏡解析
2017/11/1	機械学習・人工知能技術入門
第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション	
2017/11/8	計算生命科学のための量子化学基礎
2017/11/15	フラグメント分子軌道法に基づく創薬分子設計の現状と課題
2017/11/22	QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析
2017/11/29	生命系の分子動力学シミュレーション
2017/12/6	分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援
第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用	
2017/12/13	確率モデリング技術の基礎と応用～ビッグデータ活用のための人工知能技術～
2017/12/20	ヒトを対象とした医学研究のデザインと解析手法
2018/1/10	計算システム生物学と創薬
2018/1/17	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最適化設計
2018/1/24	Real World Data: 統計か疫学かコンピュータサイエンスか