

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

計算生命科学のための 量子化学基礎

平野 敏行（東京大学 生産技術研究所 助教）

量子化学シミュレーションは、実験化学と相補的に用いることで物性・化学反応の解明に威力を発揮する、強力な研究手法である。コンピュータの性能向上と計算手法の進歩により、これまで難しいと考えられてきた大規模生体分子の量子化学シミュレーションが実用的になりつつある。量子化学シミュレーションの理解を助ける量子化学計算理論・計算法や分子生物学の基礎から、最新のタンパク質カノニカル量子化学計算について紹介する。

- <今後の予定> 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」
福澤 薫 星薬科大学 薬学部 准教授
2017/11/22 「QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析」
鷹野 優 広島市立大学大学院情報学研究科医用情報科学専攻 教授

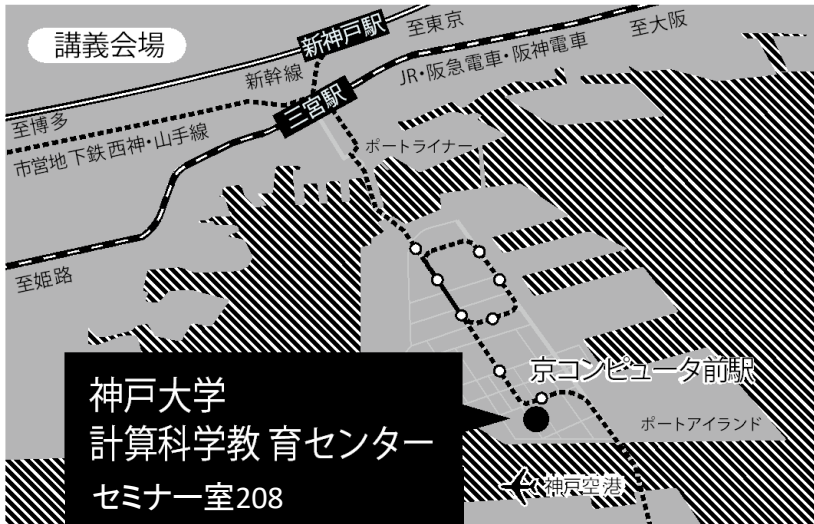
開催日時：2017年11月8日（水） 17：00-18：30

【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/

★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	ゲノム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