

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

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）

タンパク質の全電子計算が可能なフラグメント分子軌道(FMO)法によって、これまでにない高精度の構造ベース創薬が可能になってきている。FMO法は、新規化合物の精密な設計や合理的なリード化合物の最適化、インシリコスクリーニング、さらにはビッグデータに基づく創薬へと繋がることが期待されている。講義では産学官連携のFMO創薬コンソーシアムやスーパーコンピュータの活用など、FMO創薬の現状と課題について概説する。

- <今後の予定> 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
2017/11/29 「生命系の分子動力学シミュレーション」
池口 満徳 横浜市立大学大学院生命医科学研究科 教授

開催日時：2017年11月15日（水） 17：00-18：30

【申し込み方法】

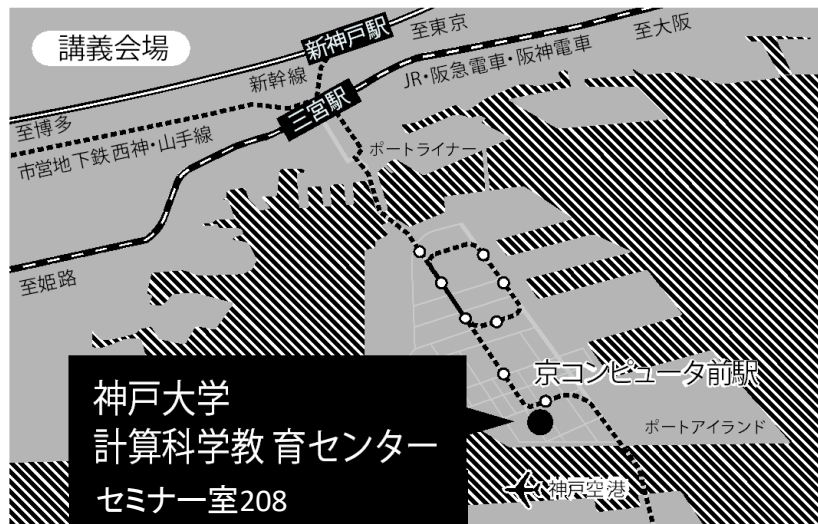
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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