

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

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

広川 貴次（産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 研究チーム長／筑波大学 教授）

タンパク質立体構造解析技術の発展により、構造生物学データを起点とした創薬支援研究が本格的に促進されている。しかし、構造生物学データの中には、特定の条件や環境に依存した構造情報もあり、そのままのデータでは創薬へ適用が難しいものがある。分子モデリングや分子シミュレーションは、このような問題を補完できる技術として注目されている。講義では、構造生物データと創薬を橋渡しする高度なインシリコ創薬支援技術について概説する。

- <今後の予定> 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～」
本村 陽一 産業技術総合研究所 人工知能研究センター首席研究員 兼 確率モデリング研究チーム長
- 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」
田中 佐智子 滋賀医科大学医学系研究科 社会医学講座 医療統計学 准教授、滋賀大学データサイエンス学部 准教授

開催日時：2017年12月6日（水） 17：00-18：30

【申し込み方法】

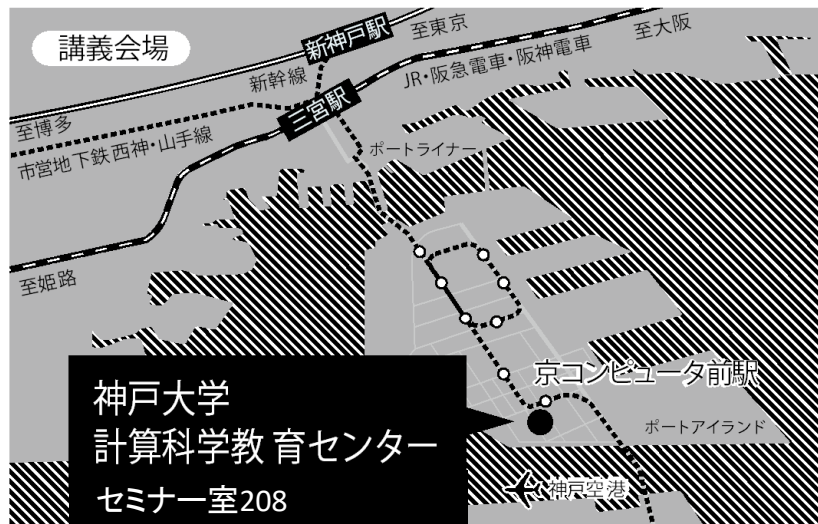
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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