

第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用

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

本間 光貴（理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター 制御分子設計研究チーム チームリーダー）

コンピュータによるモデリングを実現するための基盤技術として、1) データ統合とデータベース構築、2) 機械学習を中心とする統計モデリング、3) 一般的な基本原理に基づく数理モデリング、の3つをあげることができる。特に、異なった種類のデータを統合することは各種モデリングの鍵であり、これらの概念を中心に計算システム生物学の創薬研究への応用を概観する。

＜今後の予定＞ 2018/1/24 「real world data: 統計か疫学かコンピュータサイエンスか」
田崎 武信 塩野義製薬株式会社解析センター 元センター長

開催日時：2018年1月17日（水） 17：00-18：30

【申し込み方法】

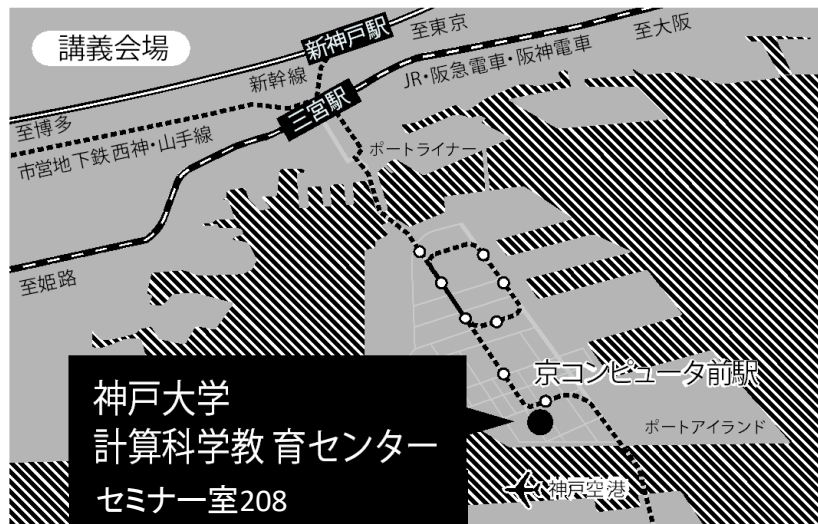
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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