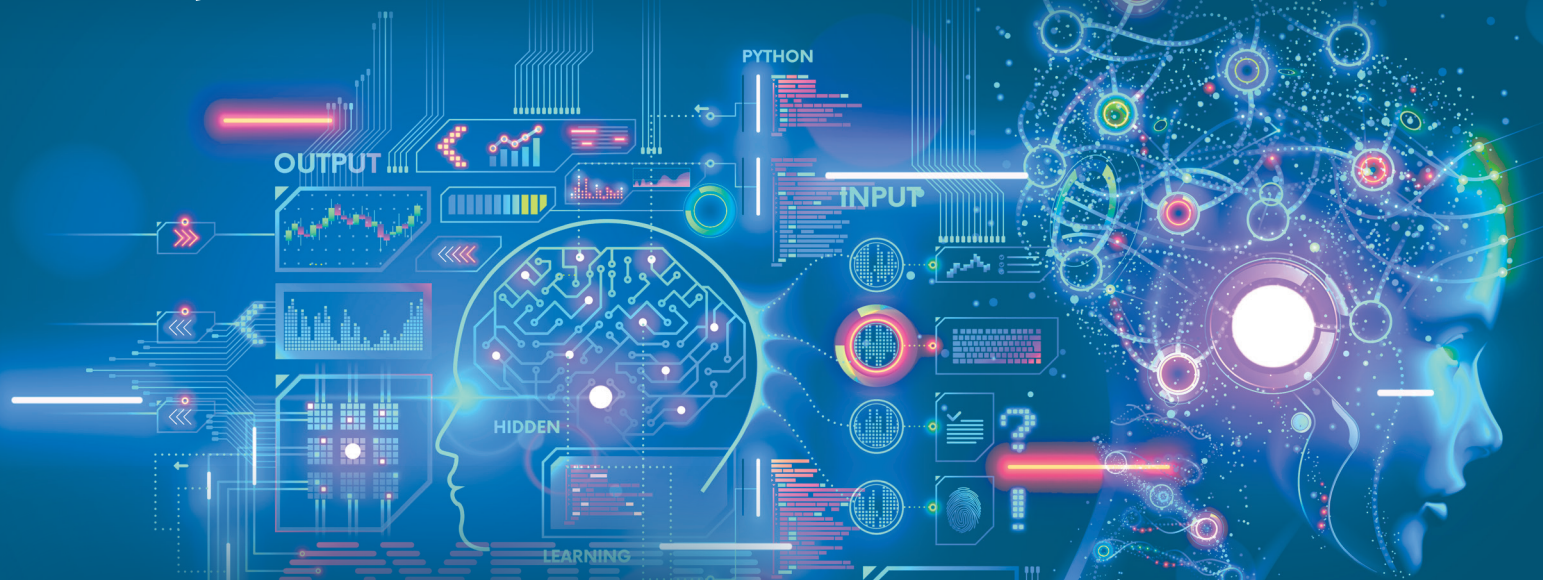


[遠隔インタラクティブ講義] 未来の医療と創薬へつながる生命科学のデータサイエンスとシミュレーション技術

計算生命科学の基礎8



企画協力: 日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

生命のしくみを理解しようとする基礎生物学や人類の未来を担う健康・医療活動と連動しながら発展してきた生命科学の重要性は言うまでもないことでしょう。このような生命科学の発展にはゲノム情報や生体分子の立体構造などのビッグデータを扱うデータサイエンスが貢献しており、ディープラーニングに代表される機械学習やAIにより未知の現象の予測をすることが可能となりました。また様々なデータをシミュレーション技術により解析することによって、生体分子からマクロな生命現象までの多様な階層を定量的に理解することも行われてきています。このような計算生命科学は、お互いが融合することにより基本的な生物学のより進んだ理解から医学・薬学・農学や健康関連分野などのさらなる発展に寄与しています。本講義では以上のように発展してきた計算生命科学の基礎、そしてそれに基づいた現在から未来への医療・創薬に貢献できる知識を提供いたします。日本バイオインフォマティクス学会・CBI学会の企画協力を得て、生命科学と理工学の学際研究領域である計算生命科学に興味を持たれる方々に、その基礎や現状、将来の展望等を学んでいただくとともに、異分野間の接点や融合研究の面白さを感じていただくことで、この学際研究分野で活躍する人材の拡充・育成に寄与することを目指しています。

2021 **10.6 WED** \ 2022 **2.2 WED**

毎週水曜日 [全15回] 17:00 - 18:30

※ただし11/3 (水・祝) のみ、11/4 (木) の開講

神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信

[担当講師]

- 中村 周吾 東洋大学 情報連携学部 教授
- 岡田 随象 大阪大学大学院医学系研究科 教授
- 村松 知成 東京大学大学院農学生命科学研究科 特任准教授
- 山下 恵太郎 英国MRC分子生物学研究所 Postdoctoral Scientist
- 富井 健太郎 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
- 大田 雅照 理化学研究所計算科学研究センター HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門 AI創薬連携基盤ユニット 上級研究員
- 常田 貴夫 北海道大学理学部CREST特別研究員/神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科客員教授
- 松林 伸幸 大阪大学基礎工学研究科 化学工学領域 教授
- 河野 秀俊 量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 生体分子シミュレーショングループ グループリーダー
- 広川 貴次 筑波大学医学医療系 教授
- 山下 宙人 株式会社国際電気通信基礎技術研究所 脳情報通信総合研究所 室長/理化学研究所 革新知能統合研究センター チームリーダー
- 柳澤 琢史 大阪大学 高等共創研究院 教授
- 近藤 次郎 上智大学 理工学部 物質生命理工学科 准教授
- 木村 建次郎 神戸大学数理・データサイエンスセンター 教授
- 松村 泰志 独立行政法人国立病院機構 大阪医療センター 院長/大阪大学名誉教授・招聘教授 (医療情報学担当)

オンライン
受講

聴講無料
事前登録制

神戸市中央区港島南町7-1-48 神戸新交通ポートライナー「計算科学センター駅」を降りてすぐ

共 催: 神戸大学計算科学教育センター、神戸大学産官学連携本部、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、医薬基盤・健康・栄養研究所、京都大学大学院医学研究科ビッグデータ医科学分野、計算科学振興財団、日本生物学的精神医学会、兵庫県立大学データ計算科学連携センター、一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム、理化学研究所 計算科学研究センター、量子科学技術研究開発機構

後 援: 兵庫県、神戸市、公益財団法人神戸医療産業都市推進機構、NPO法人パイオグリッドセンター関西、日本薬学会

▶プログラム詳細はこちら!

登録受付中

計算生命

検索



計算生命科学の基礎8 スケジュール

第1編 生命科学のためのデータサイエンスの基礎

10.6 [水] **機械学習・深層学習と生命科学** 初心者向け
中村 周吾(東洋大学 情報連携学部 教授)

生命科学分野では、ヒトゲノム計画を端緒として、他分野に先駆けてビッグデータ時代を迎え、ゲノム塩基配列、アミノ酸配列、生体分子立体構造等に機械学習・深層学習の方法を適用するインフォマティクス解析、分子構造に物理化学的手法を適用するシミュレーション解析が行われてきた。本講義では、社会全体に急速に応用が広がった機械学習・深層学習の方法の原理と、それがタンパク質のアミノ酸・立体構造の解析にどのように応用されているのかを、事例を交えて紹介する。

10.13 [水] **遺伝統計学で迫る疾患病態解明、創薬、個別化医療**
岡田 随象(大阪大学大学院 医学系研究科 教授)

遺伝統計学は、遺伝情報と形質情報の因果関係を統計学の観点から検討する学問分野である。数百万人規模の大規模ヒト疾患ゲノム情報を大容量のオミクスデータと分野横断的に解釈し、社会還元するための学問へのニーズが高まっている。細胞組織特異性に着目した疾患病態の解明、メタゲノム・メタボローム解析等の新規オミクス情報の開拓、機械学習・深層学習など革新的情報処理技術の適用、ゲノム情報に基づく新規創薬の試み、ゲノム個別化医療の社会実装など、遺伝統計学が今後取り組むべき課題を本講演で紹介する。

10.20 [水] **文献データマイニングの基礎**
村松 知成(東京大学大学院農学生命科学研究科 特任准教授)

文献データマイニングとは、巨大な文献データを用い、その中の個別の対象(単語、熟語、用語)の性質や意味などの情報、あるいは対象間の関係性などを統合的に導き出すことを目指す手法である。手順としては文章の局所領域(文、パラグラフなど)から情報を抽出し文献データ全体にわたって統合する。この手法の概要ならびに約3千万件の医学・生物学文献情報を有するPubMedデータベースを用いた我々の取り組みを紹介する。

10.27 [水] **結晶学・単粒子解析による分子構造データの基礎**
山下 恵太郎(英国MRC分子生物学研究所 Postdoctoral Scientist)

Protein Data Bank (PDB)にはタンパク質・核酸をはじめとする生体高分子の多種多様な立体構造情報が蓄積されている。本講義ではこのうち大部分を占めるX線結晶構造解析と、近年の技術革新により急速に分解能・解析例ともに伸びてきているクライオ電子顕微鏡(単粒子解析法)に焦点を当てて説明する。特に、立体構造情報を利用する立場の方々に知っておいて欲しいことについて議論したい。

11.4 [木] **機械学習によるタンパク質立体構造予測**
富井 健太郎(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)

AlphaFold 2の登場により、タンパク質アミノ酸配列からの立体構造予測の精度が格段に向上した。これは、タンパク質の配列および立体構造データの蓄積と、深層学習の発達に負うところが大きい。本講義では、タンパク質立体構造予測の近年の潮流を軸に、立体構造予測法の基礎や立体構造解析/決定への応用などについて紹介する。

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

11.10 [水] **AIを用いた創薬の新展開**
大田 雅照(理化学研究所計算科学研究センター HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門 AI創薬連携基盤ユニット 上級研究員)

深層学習(Deep Learning)を筆頭とする人工知能(Artificial Intelligence, AI)技術は、様々な分野で社会にインパクトを与え、イノベーションを引き起こしつつある。本講義では、創薬、特に活性物質取得から前臨床研究における、その具体的な応用例を示すと共に、その基盤となっている多様なAI技術を紹介する。AIの創薬応用について、理論と応用の両側面から理解することにより、創薬現場において、その具体的な応用を発案・実施できるようにすることを狙いとする。

11.17 [水] **分子軌道認証: データ科学を利用した簡便な反応電子論** 初心者向け
常田 貴夫(北海道大学理学部CREST特別研究員/ 神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 客員教授)

有機電子論やフロンティア軌道論のような反応電子論は、電子の動きをもとに反応の駆動要因を解釈する簡便な手法である。定量的軌道エネルギーをもとにこれを展開した反応性軌道エネルギー論は、反応を駆動する反応性軌道を特定できる。最近、この理論に機械学習を導入し、反応前後の情報だけで分子軌道の対応関係を求める分子軌道認証を開発した。本講義では、分子軌道認証を説明するとともに、認証により明らかになった先進的な電子論的解釈を紹介する。

11.24 [水] **溶液中における生体関連分子複合体の自由エネルギー解析** 初心者向け
松林 伸幸(大阪大学 基礎工学研究科 化学工学領域 教授)

溶液中におけるタンパク質や脂質などの生体関連分子は、溶媒との分子間相互作用の下で構造を形成し機能を発現する。本講義では、分子シミュレーションと溶液統計力学理論の融合に基づく生体関連分子複合体の自由エネルギー解析を概説する。統計力学と分子シミュレーションの基礎から出発して、溶媒和理論の構成について述べ、タンパク質構造に対する共溶媒効果、タンパク質複合体の安定性、および、タンパク質-脂質膜相互作用の分子レベル解析に進む。

12.1 [水] **分子モデリング・シミュレーションから見るクロマチンポテンシャル**
河野 秀俊(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 生体分子シミュレーショングループ グループリーダー)

真核生物のゲノムはクロマチンとして細胞核にコンパクトに収納されている。その収納状態は、クロマチンの翻訳後修飾(エピジェネティックな変化)に応じて変化し、遺伝子の発現制御と密接な関係があることが分かってきた。本講義では、クロマチンの分子構造とそのダイナミクスについて、研究の最新線を紹介する。

12.8 [水] **インシリコ創薬の基礎と応用**
広川 貴次(筑波大学医学医療系 教授)

インシリコ創薬の代表的なアプローチであるLigand-based drug design (LBDD)およびStructure-based drug design (SBDD)について、基本的な内容及び、それぞれ長所や創薬支援に活用する際のポイントについて概説する。さらに応用例についても国内外の先行研究をいくつか紹介したい。

第3編 未来をみすえた医療、創薬への応用

12.15 [水] **電流源推定を用いたヒト脳機能研究** 初心者向け
山下 由人(株式会社国際電気通信基礎技術研究所 脳情報通信総合研究所 室長/理化学研究所 革新知能統合研究センター チームリーダー)

脳波・脳磁図(EEG・MEG)は聴覚検査やてんかん術前診断などの臨床応用だけでなく、ヒトの脳活動ダイナミクスを調べる方法として認知神経科学の基礎研究にも利用されてきた。近年、計測の多チャンネル化・計算機の高性能化・脳構造モデルの高精度化に伴い、EEG・MEGの生データから脳内の活動源をイメージングする“電流源推定法”の重要性が増してきている。本講義では、電流源推定法の研究動向、技術的背景、当研究チームで行っている最近の研究について解説する。

1.12 [水] **Brain-Computer Interfaceによる脳情報の伝達と修飾**
柳澤 琢史(大阪大学 高等共創研究院 教授)

脳波などを機械学習によって読解(Decoding)し、その情報に基づいて機械を制御するBrain-Computer Interface (BCI)は、脳とAIを融合する技術でもある。特に、侵襲的脳信号を用いた高精度の脳情報読解によるBCIは医療応用が期待されている。本講義では、BCIの基礎から臨床応用の現状を説明し、BCIが脳に及ぼす影響について、幻肢痛に対するBCI治療を例として議論する。

1.19 [水] **立体構造情報を活用した核酸医薬品・核酸標的の低分子医薬品のデザイン** 初心者向け
近藤 次郎(上智大学 理工学部 物質生命理工学科 准教授)

DNAやRNAといった核酸分子は、医薬品としても、医薬品の標的としても、創薬分野で注目を集めている。核酸医薬品は低分子医薬品、タンパク質医薬品に次ぐニューモダリティとして次々と上市されている。また、タンパク質を標的としてきた従来の低分子医薬品を、核酸を新たな標的とすることで再利用する動きもある。本講義では、当研究室で行っている核酸の立体構造情報を活用したドラッグデザインについて紹介し、計算科学が関わる核酸創薬の将来展望についてお話ししたい。

1.26 [水] **命を救う数式**
木村 建次郎(神戸大学数理解・データサイエンスセンター 教授)

病院にあるレントゲンやCTのような、強いエネルギーの電磁波ではなく、異なる物質の界面で大きく散乱する弱いエネルギーをもつ電磁波、すなわち散乱性の高い電磁波を使ってその散乱波から物体の形を導き出す「波動散乱逆問題」の開発に世界で初めて成功した。この問題は「波動散乱逆問題」といわれ、応用数学史上の未解決問題として知られている。本講義では、その数学上の問題を解決し、スタートアップの創薬として様々な分野に社会実装した経緯についてお話しする。

2.2 [水] **有効なReal World Dataを集積するための戦略**
松村 泰志(独立行政法人国立病院機構 大阪医療センター 院長 /大阪大学名誉教授・招聘教授(医療情報学担当))

医療情報が電子化され、このデータを利用することで臨床研究に利用するコンセプトが打ち出され、海外では成功事例があり、国際的に注目されてきている。しかし、日本では目立った成功事例は出ていない。医療情報が電子化されたこと、これを研究利用可能とすることの間にギャップがあり、これを乗り越えなければReal World Dataを活用できるようなにはならない。このギャップとは何か、どうすれば乗り越えることができるのかについて講義する。



➤ **アーカイブサイト 公開中**
過去の講義を視聴できます

[コーディネーター]伊藤 眞里(医薬基盤・健康・栄養研究所 パイオインフォマティクスプロジェクト上席研究員)、江口 至洋(神戸大学産官学連携本部 客員教授)、河野 秀俊(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 生体分子シミュレーショングループ グループリーダー)、白井 剛(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部フロンティアバイオサイエンス学科教授)、田中 成典(神戸大学大学院システム情報学研究所 教授)、間島 慶(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子情報科学グループ 研究員)、森 一郎(神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 客員教授)、森 義治(神戸大学大学院システム情報学研究所 講師)、八幡 恵明(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命情報科学グループ グループリーダー)

参加申込

神戸大学計算科学教育センターホームページの申込フォームからお申込み下さい。本講義案内についても公開しています。

☞ http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science8/

受講方法

Zoomでの遠隔受講が基本となります。さらに、神戸大学計算科学教育センターでの講義の場合には、会場での直接受講も可能となります。(詳細はホームページをご覧ください)



問合せ **神戸大学計算科学教育センター**
☎ 078-599-6720 ✉ ls-contact@eccse.kobe-u.ac.jp