



# 開催報告書

遠隔インタラクティブ講義

## 計算生命科学の基礎

2019年度・2020年度



神戸大学計算科学教育センター

## 目次

はじめに	1
遠隔インタラクティブ講義について	2
2019 年度「計算生命科学の基礎 VI」	3
アンケート結果について	10
大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会 (AXIES2019)	16
2020 年度「計算生命科学の基礎 VII」	21
アンケート結果について	28
コーディネーターコメント	36



## はじめに

---

皆様のおかげをもちまして、2014 年度に開講された遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」も 7 年目を迎え、今期の講義を無事終了することができました。本シリーズは、シミュレーション科学やデータ科学などの手法を用いた生命科学の基礎的な内容や最先端の研究の現状を、第一線で活躍されている著名な研究者の方々に講義していただいております。また、生命科学に興味を持つ若手研究者の育成とともに産業界を含めて当該分野の裾野を広げることを目的とした連続講座です。

2020 年度は、新型コロナウイルス感染症拡大防止のため、残念ながらほとんどの講師の先生方に神戸においでいただくことができず、遠隔からの授業配信を行っていただきました。ご不便をおかけしまして大変申し訳ありませんでした。また、コロナ禍にも関わらず毎回素晴らしい講義を配信いただきまして担当コーディネーターの先生方は大変感謝しています。おかげ様で本年度の講義登録者数は、大学や研究機関および企業の方々を含め 1000 名を超えました。Webex を用いて中継する遠隔インタラクティブ講義には毎回 400 名前後の方がリアルタイムで受講していただきました。アカデミアのみならず企業の研究者を含め、このように多くの方々に本遠隔講義にご参加いただいていることに対して驚きを感じるとともに、受講者の皆様の修学意識の強さ、そして当該研究分野の注目度の高さに改めて驚嘆しています。また、これまでの講義内容のほとんどは理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)のご好意により、デジタルアーカイブ化され e-Learning 教材として公開されています。講義を受講できなかった方々にも、後日受講できる機会を提供していますので、是非ご利用ください。

この開催報告書は、2019,2020 年度の 2 年間の実施活動内容と、聴講者のアンケートを取りまとめたものです。2014-2016 年度および 2017,2018 年度の開催報告書も HP から入手できますので合わせてご覧いただけますと本シリーズで提供されたこれまでの講義の内容やテーマについてご理解していただけるかと思えます。当初は計算科学手法を軸とした生命科学の基礎的な内容が主体でしたが、昨今のビッグデータ解析や AI の普及に伴い、これらに関するデータ科学の観点も取り入れた講義も多くなってきました。主催者側も時代に即した講義内容を毎回検討して提供できるように心がけておりますので、今後とも是非ご期待ください。

最後になりますが、本遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」に対して、ご支援、ご協力を頂きました多くの方々に感謝の意を表するとともに、今後も本講義がますます充実し、発展していくことを願っています。

令和 3 年 3 月

神戸大学計算科学教育センター  
センター長 臼井英之



## 遠隔インタラクティブ講義について

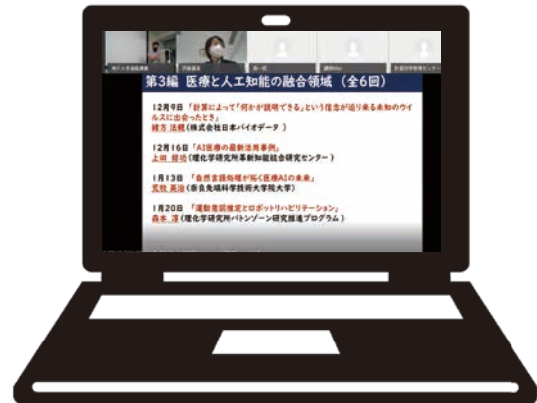
遠隔インタラクティブ講義は、WEB 会議システム（Webex）を利用し、会場（神戸）から各地の受講者にリアルタイムに配信する講義です。受講者はインターネット接続環境があれば、各自のパソコンやモバイル端末等でどこからでも無料で視聴ができ、講師への質問等もチャット機能でやりとりができます。

### 【講義日前日】

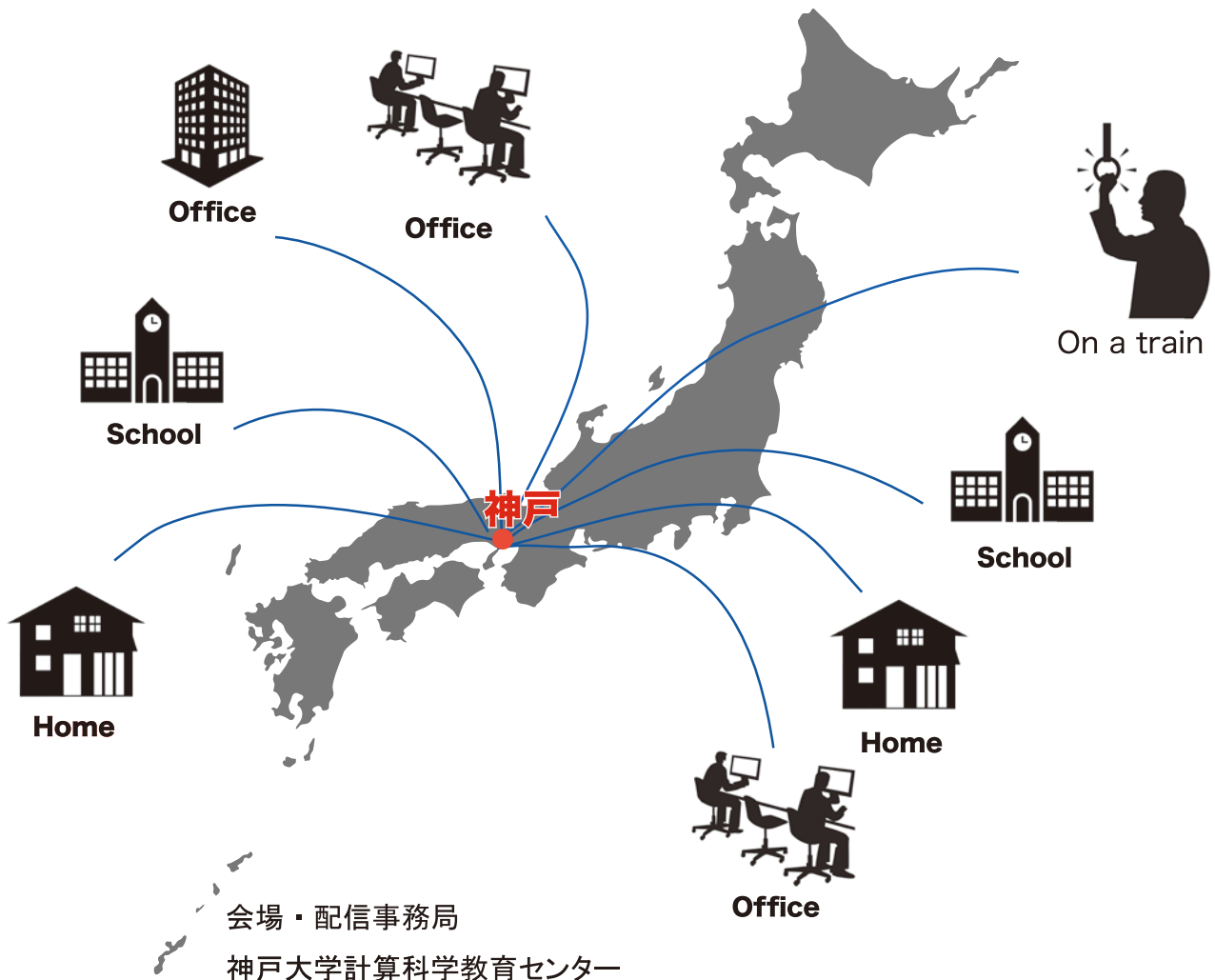
アクセス用 URL の記載された招待メールを全受講者に一齐送信します。

### 【講義日当日】

講義開始時間に URL にアクセスするだけで視聴ができます。受講者から音声でのアクセスは出来ませんが、チャット機能で質問や問合せが可能です。



受講者 PC 等の画面



2019年度  
計算生命科学の基礎VI



## 目的

近年、ヒトを含めた生物・生態系とそれを取り巻く環境に関わる大規模データ（ビッグデータ）の蓄積と、それらを解析するデータサイエンスやシミュレーション技術の進展により、生命科学が大きく変貌を遂げています。実験・観測装置や計算機・情報技術の急速な進歩に伴い、生体分子からマクロ生命系まで、即ち、ゲノムレベルの遺伝情報、タンパク質・核酸の立体構造と相互作用等から細胞レベルの代謝・生理機能や疾患までの高次生命活動の多階層のビッグデータを網羅的かつ定量的に解析し、シミュレーションにより予測して、それらの統合により「生命のしくみ」を根本から理解し、介入することが可能となりました。ディープラーニングに代表される機械学習・AI技術の発展もそれを後押しし、インシリコ技術を統合的に活用する「計算生命科学」は、現代の生命科学の推進に不可欠な知識基盤を提供しています。そしてその適用領域は、基礎生物学から医学、薬学、健康科学、農学、環境科学、生態学、疫学等の幅広い分野にわたっており、今後、ゲノム医療やデジタルヘルスケアなどの先端技術の基盤としても期待されています。6年目を迎えた今回の遠隔講義では、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、その現状と将来の展望を学んでいただき、基礎から応用までの研究開発を支える人材の育成に寄与することを目指しています。

## 対象

大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者

## 共催、後援、協力

共催：神戸大学計算科学教育センター、神戸大学学術・産業イノベーション創造本部、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、理化学研究所 生命機能科学研究センター ポスト「京」重点課題1、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、理化学研究所 計算科学研究センター、計算科学振興財団、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

後援：兵庫県、神戸市、神戸医療産業都市推進機構、公益財団法人都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西

企画協力：日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

## 運営体制

### ▼企画コーディネーター

伊藤 眞里（医薬基盤・健康・栄養研究所 バ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（神戸大学学術・産業イノベーション創造本部 客員教授）

白井 剛（長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授）

田中 成典（神戸大学大学院 システム情報学研究科 教授）

森 一郎（神戸大学大学院 科学技術イノベーション研究科 特命教授）



渡邊 博文（神戸大学計算科学教育センター 研究員）

▼配信・運営担当

臼井 英之（神戸大学計算科学教育センター）

横川 三津夫（神戸大学計算科学教育センター）

鈴木 洋介（神戸大学計算科学教育センター）

渡邊 博文（神戸大学計算科学教育センター）

土井 陽子（理化学研究所 生命機能科学研究センター）

倉 仁美（神戸大学計算科学教育センター）

## 開催日程

---

2019年10月2日～2020年1月29日 毎週水曜日、全15回 17:00-18:30

## 講義会場

---

神戸大学計算科学教育センター セミナー室 （兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-48）

## インターネット講義配信

---

インターネット会議システムサービス「Webex」を使用し、受講者へ同時配信。

## 担当講師

---

- ・長尾 知生子（医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬デザイン研究センター インシリコ創薬支援プロジェクト サブプロジェクトリーダー）
- ・大江 和彦（東京大学大学院医学系研究科 医療情報学分野 教授）
- ・鳶田 雅光（タカラバイオ株式会社 CDM センター 専門部長）
- ・瀬々 潤（株式会社ヒューマノーム研究所 代表取締役社長／東京医科歯科大学 特任教授  
／産業技術総合研究所 人工知能研究センター 招聘研究員）
- ・谷嶋 成樹（三菱スペース・ソフトウェア株式会社 関西事業部 バイオメディカルインフォマティクス開発部 部長）
- ・常田 貴夫（神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授）
- ・林 重彦（京都大学大学院理学研究科 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）
- ・田中 成典（神戸大学大学院システム情報学研究科 教授）
- ・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）
- ・池口 満徳（横浜市立大学大学院生命医科学研究科 教授）
- ・水口 賢司（医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト  
プロジェクトリーダー）
- ・朝長 毅（医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬標的プロテオミクスプロジェクト／プロテオームリサーチプロジェクト 上級研究員）
- ・八木 康史（大阪大学 産業科学研究所 教授）

- ・水野 敬（理化学研究所健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム健康計測解析チーム・新規計測開発チーム チームリーダー）

## 講義内容

第1編 生命のデータサイエンスから社会実装まで
<p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Mark L. Braunstein Health Informatics on FHIR: How HL7's New API is Transforming Healthcare Springer 2018</li> <li>2. 中釜齊 監修「動き始めたがんゲノム医療」実験学増刊 36 2018</li> <li>3. 松本 直通, 難波 栄二, 古川 洋一 編集 「臨床応用に向けた疾患シーケンス解析」遺伝子医学MOOK34 2018</li> <li>4. 瀬々潤, 浜田道昭 「生命情報処理における機械学習：多重検定と推量設計」講談社サイエンティック 2014</li> <li>5. 二階堂愛 実験医学別冊 次世代シーケンス解析スタンダード 羊土社 2014</li> <li>6. 宮園浩平他 「デヴィータがんの分子生物学第二版」メディカルサイエンスター、2017</li> </ol>
<h3>1.1 「構造インフォマティクスの基礎」（担当：長尾 知生子）</h3> <p>生体内で起こるシグナル伝達や化学反応を理解するためには、その分子的な担い手であるタンパク質の立体構造と分子認識機構を解析する必要がある。本講義では、特異的な相互作用という切り口から、基礎から応用まで、構造インフォマティクスについて解説する。</p>
<h3>1.2 「リアルワールド医療情報から人工知能開発へ」（担当：大江 和彦）</h3> <p>電子カルテの普及により臨床現場でのリアルワールド医療データの電子的記録と蓄積が進んでいるが、データの標準化や品質管理面でまだまだ多くの課題もある。一方で、このデータを多施設ビッグデータとして研究開発に活用するプロジェクトがいくつも実施されており、人工知能（AI）システムの開発や医学知見発見への貢献が期待されている。本講義ではこうしたデータ収集とデータ活用状況とそこに内在する課題、そして医療でのAI開発の状況などを概説する。</p>
<h3>1.3 「クリニカルシーケンシングの基礎と実践」（担当：鷹田 雅光）</h3> <p>次世代シーケンサーを用いてがん関連遺伝子変異を網羅的に検出し適切な分子標的薬を選択するクリニカルシーケンシングが実践され始めている。本講義では、国内のがんゲノム医療の提供体制とがんパネル検査の状況を紹介します。また、大阪大学医学部附属病院において実施しているクリニカルシーケンシングの実践状況を具体的に紹介し、クリニカルシーケンシングの実施の必要要件とバイオインフォマティクスの役割を解説する。</p>

#### 1.4 「機械学習・人工知能技術入門」(担当: 瀬々 潤)

生命科学において計測されるデータを解析することで、基礎面では生命の理解、応用面では医療、創薬、薬学、農学へと繋がる期待は高い。本講義ではこれらの解析の基礎となる機械学習や数理統計技術の説明にはじまり、人工知能の導入を解説する。また、人工知能と現在の産業との関わりや計算生命科学の応用に関する重要性を紹介する。

#### 1.5 「バイオメディカルインフォマティクス概論」(担当: 谷嶋 成樹)

臨床現場におけるバイオインフォマティクスの役割をのべる。近年臨床現場でバイオインフォマティクスのニーズが急速に高まっている。特に2019年に保険収載予定のがんゲノム検査については、バイオインフォマティシャンがエキスパートパネルと呼ばれる専門家会議の必須の構成要員とされている。また、今後臨床研究の広がりが加速するiPS細胞を応用した再生医療等でも細胞のゲノム評価が必須のプロセスである。このように、臨床現場やそれに近い研究の現場でのバイオインフォマティクスの役割について、実際のデータを交えながら解説する。

### 第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

[参考図書]

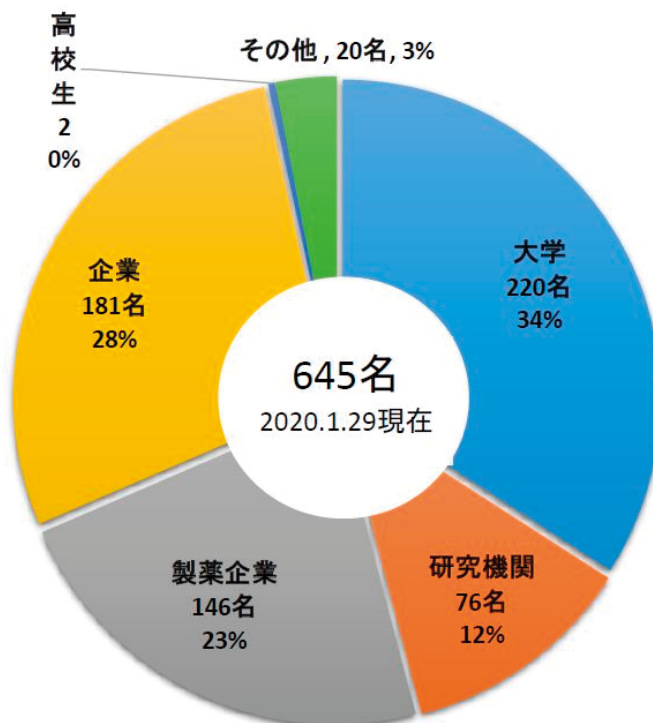
1. 常田貴夫「密度汎関数法の基礎」講談社 2012
2. 林重彦, 「ハイブリッド分子シミュレーションによるロドプシン光受容体の分子機能の理解と設計」医学のあゆみ 第5土曜特集号「生命現象を観るー革新的な構造科学が観せてくれる世界」 医歯薬出版株式会社, 2017, 262, 552-558
3. 林重彦, 「ハイブリッド分子シミュレーションと実験研究の接点で見える生体機能のメカニズム」化学フロンティア 23 「1 分子ナノバイオ計測ー分子から生命システムを探る革新的技術」化学同人, 第6章, 89-98 (2014)
4. 林重彦, 「タンパク質の生物学的機能と化反応」岩波講座計算科学第4巻 「計算と生命」岩波書店, 第3.3章, 98-112 (2012)
5. QM/MM geometry optimization on extensive free-energy surfaces for examination of enzymatic reactions and design of novel functional properties of proteins. Shigehiko Hayashi\*, Yoshihiro Uchida, Taisuke Hasegawa, Masahiro Higashi, Takahiro Kosugi, and Motoshi Kamiya. Annu. Rev. Phys. Chem., 68, 135-154 (2017). DOI: 10.1146/annurev-physchem-052516-050827
6. <https://sourceforge.net/p/ermod/wiki/doc-LectureNotes>
7. <https://sourceforge.net/p/ermod/wiki/doc-Theories>
8. 田中成典「計算分子生物学: 物質科学からのアプローチ」内田老鶴圃 2018年
9. 田中成典「量子生命科学の展望」、実験医学 Vol. 35, No. 14 (2017年9月号) 2423-2427.
10. 田中成典「生体分子夾雑系の理論計算化学: 分子論から生命論へ」、現代化学 No. 579 (2019年6月号) 47-51.
11. S. Tanaka, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, Y. Okiyama and K. Fukuzawa, "Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems" Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 10310-10344 (2014)

<b>2.1 「量子化学計算の現在と近未来」 (担当：常田 貴夫)</b>
<p>量子化学計算は反応解析や材料設計の実験検証に不可欠な手段となっている。その主要理論が密度汎関数法 (DFT) であり、現在 9 割を超える量子化学計算で利用されている。DFT は化学を取り扱うために精度を高め、従来の量子化学では困難とされてきた問題を続々解決してきた。近年、DFT をさらに発展させる可能性がある要素としてデータ科学が注目を集めている。本講義では、最新の DFT とデータ科学の導入による発展の可能性について紹介する。</p>
<b>2.2 「ハイブリッドQM/MM 法による生体分子機能解析」 (担当：林 重彦)</b>
<p>酵素活性や生体情報・エネルギー変換など、生体分子の顕著な分子機能では、局所的な反応活性中心部位の触媒化学反応が大域的な機能的分子構造変化と相関することにより達成されている。そのような大きな生体分子中における化学反応解析を可能にするのがハイブリッド QM/MM 法である。本講義では、ハイブリッド QM/MM 法の理論的背景を概説し、それをを用いた生体分子機能に関する研究を紹介する。</p>
<b>2.3 「溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析」 (担当：松林 伸幸)</b>
<p>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揮する。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系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。</p>
<b>2.4 「大規模分子系の第一原理計算と量子生命科学」 (担当：田中 成典)</b>
<p>量子力学に立脚した第一原理電子状態計算は、生体分子系の関わる相互作用や励起ダイナミクスを定量的に記述する上での基礎となる。本講義では、生体分子系の量子化学計算アプローチの一つとしてフラグメント分子軌道法の基礎と応用を紹介するとともに、近年注目を集めている「量子生命科学」への展開についても触れる。生命系において「量子性」を論じることの意味・意義について、様々な観点から、できるだけ簡明に述べたい。</p>
<b>2.5 「インシリコ創薬支援のための分子シミュレーション活用法」 (担当：広川 貴次)</b>
<p>クライオ電顕をはじめとするタンパク質立体構造解析技術の発展により、構造データを起点とした創薬支援研究が再び注目されてきている。しかし、構造データの中には、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基礎と応用例について紹介する。</p>
<b>第3編 ビッグデータ・AI の健康科学への活用</b>
<p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 渡辺 恭良 (編集), B.H. Natelson (編集), L.A. Jason (編集), B. Evengard (編集), 倉恒 弘彦 (編集) 「Fatigue Science for Human Health」 Springer Japan 2018</li> <li>2. 渡辺 恭良 (著), 水野 敬 (著), 浦上 浩 (著) 「おいしく食べて疲れをとる」 オフィスエル 2016</li> </ol>

3. 渡辺 恭良 (著), 水野 敬 (著) 「疲労と回復の科学 (おもしろサイエンス)」日刊工業新聞社 2018
<b>3.1 「生体系分子シミュレーションの新展開」 (担当: 池口 満徳)</b>
生体系の分子シミュレーションは、生体分子の立体構造に基づく機能理解 (創薬等も含) によく用いられており、コンピュータの性能が上がるにつれ、その適用範囲は拡大を続けている。日本でも、「京」の次のスーパーコンピュータ「富岳」の構築が始まり、今後の活用に期待が持たれている。本講義では、ポスト「京」と呼ばれていた「富岳」での生体系分子シミュレーション研究の展望や人工知能技術との連携などについて解説する。
<b>3.2 「健康・医薬研究の基盤としてのデータ統合と人工知能活用」 (担当: 水口 賢司)</b>
コンピュータフレンドリーな形に整理されたデータをどれだけ利用できるかが、人工知能開発の成否に大きな影響を与える。本講義では、マイクロバイオームデータ解析や薬物動態モデリングなどの具体例を用いて、データ統合とデータベース構築の重要性について、さらに社会実装に向けた試みを議論する。
<b>3.3 「プロテオミクスから得られるビッグデータをいかに診断・治療に結びつけるか？」 (担当: 朝長 毅)</b>
プロテオミクス技術の飛躍的進歩により、1回の解析から万単位のタンパク質・リン酸化タンパク質の同定・定量情報が得られる時代になった。本講演では、そのプロテオームビッグデータをいかに病気の診断や治療に応用するかについて、我々が現在取り組んでいる、がんの早期診断法およびオーダーメイド治療法の開発を中心に紹介したい。
<b>3.4 「歩き方からわかること～個人認証から健康長寿まで～」 (担当: 八木 康史)</b>
画像処理の分野においては、人の歩き方から個人を認証することを歩容認証 “Gait recognition” という。歩容認証は、個人毎で体型や動きが異なることに着目した個人認証技術で、自治体・警察支援によるスーパー防犯灯、商店街、スーパー等における防犯カメラなど、さまざまな場所に設置された防犯カメラ映像から、容疑者を特定する技術として期待されている。では、どうやって個人認証を行うのか。本講演では、我々が提案する歩容認証技術の概要と課題、さらに、歩容を使った新たな応用である健康利用について紹介する。
<b>3.5 「ヘルスケアビッグデータ解析により開発した健康関数」 (担当: 水野 敬)</b>
「健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス」 ( <a href="https://rc.riken.jp/">https://rc.riken.jp/</a> ) は、より正確な健康維持・増進への指針、つまり将来にわたり健康で“生き活き”とした人生を送っていく上での「羅針盤」の提供を目指している。そのために、主に疲労科学の知見に基づく健康計測項目を定め、2,000人以上のヘルスケアビッグデータを取得し、健康増進～疾患発症前段階の未病状態と、健康度を精緻に把握するための新しい概念「健康関数」の開発を行った。本講演では健康関数開発状況と未病克服のためのソリューション開発の応用など今後の活用法について紹介したい。

## 受講登録者状況等

2019年度は645人（最終）

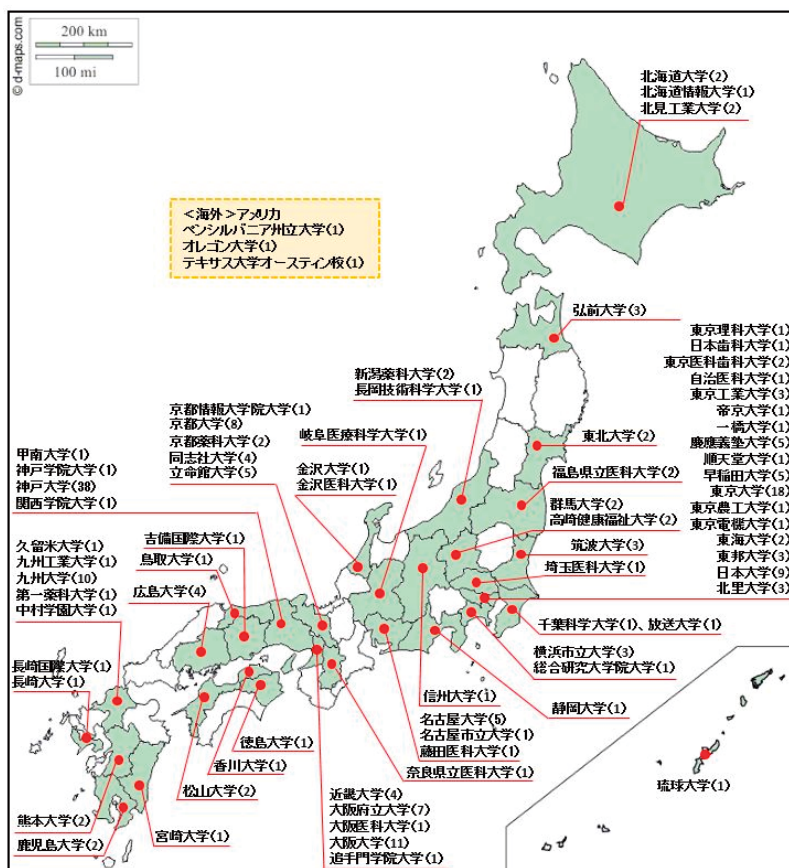


### 計算生命科学の基礎VI 申込登録者所属大学分布

2020/1/29現在

- ・国内73大学(32都道府県)
  - ・海外3大学
- 合計220名

高等学校2校、2名



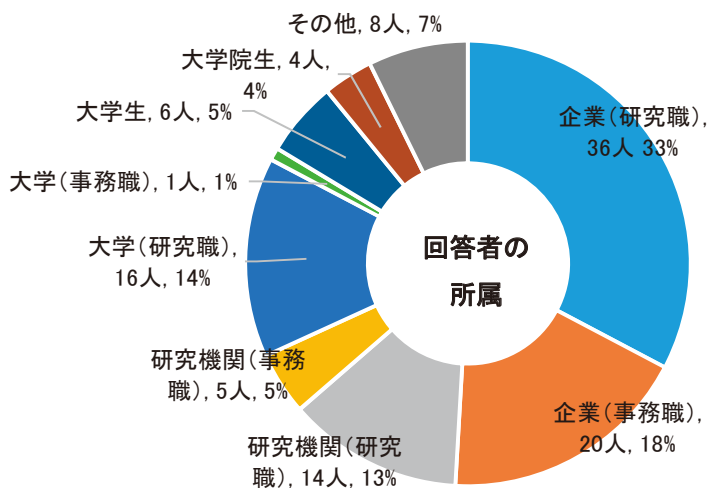
## 受講者アンケート（講義終了後）

### 【調査概要】

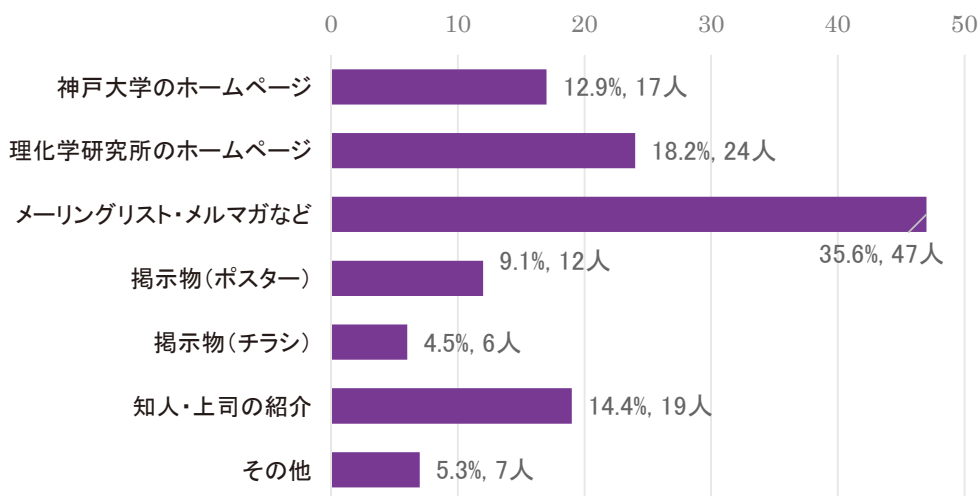
1. 対 象 「計算生命科学の基礎Ⅵ」の受講登録者
2. 標 本 数 645人（2020年1月29日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査機関 2020年2月3日（月）～2020年2月28日（金）
5. 回 収 数 109
6. 回 収 率 約16.8%

### 【アンケート結果】※アンケート結果の内容を一部抜粋

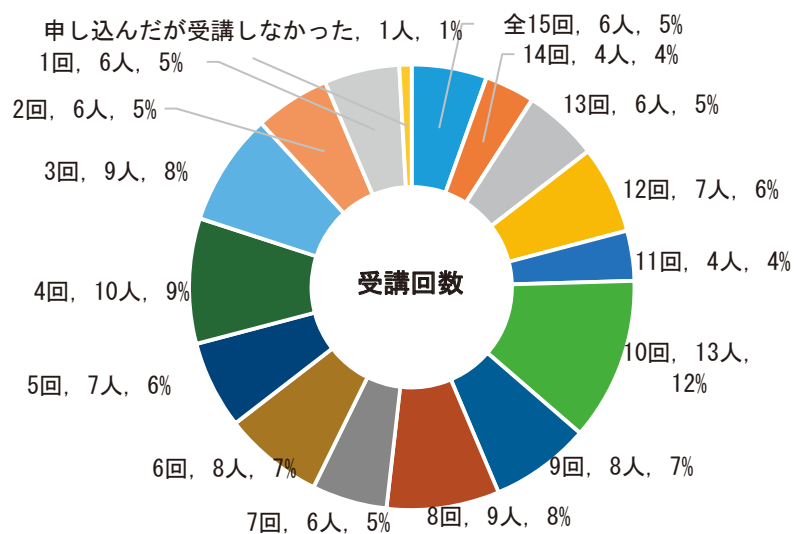
#### 1. 所属について



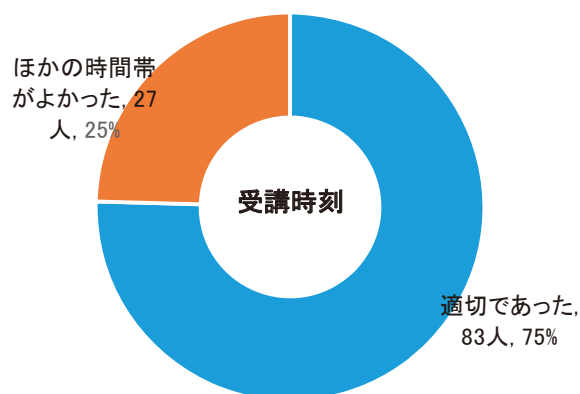
#### 2. 講義を知ったきっかけについて（回答数が多かったもの）



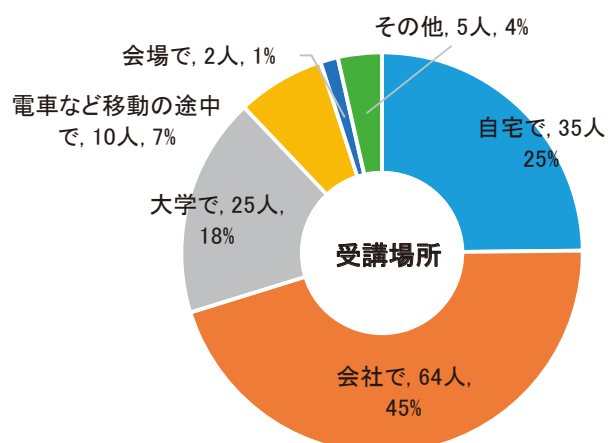
### 3. 受講回数



### 4. 講義時刻について



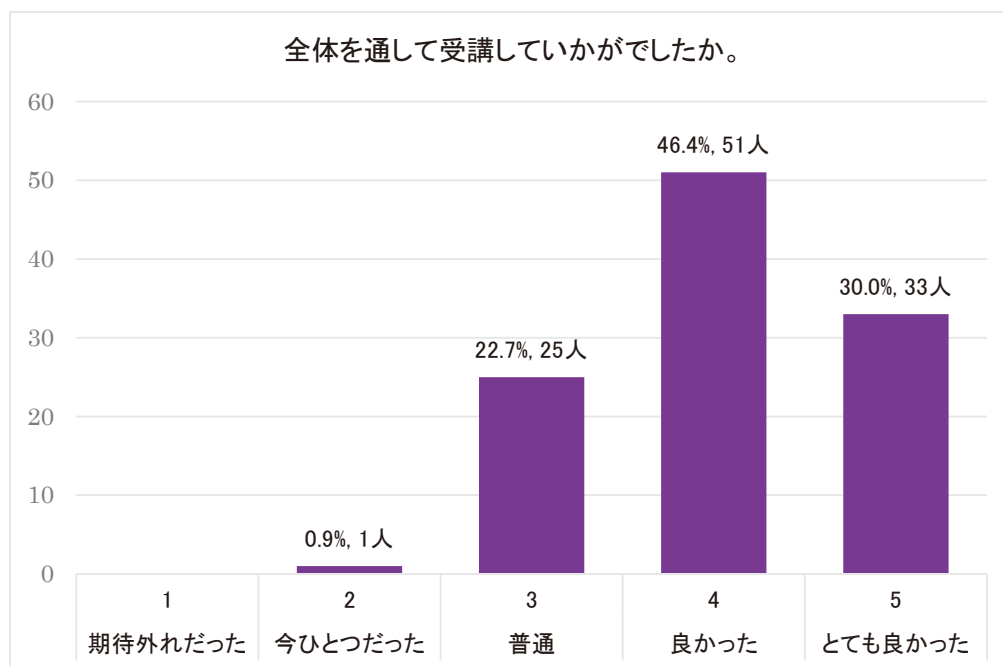
### 5. 受講場所について





## 6. 講義全体の感想について

- ・ 毎年新たな発見があり、興味深く受講させて頂いております。これだけ充実した内容の講義を遠隔かつ無料で受講できることは特に社会人にとっては非常に助かります。今後も期待致しております。
- ・ 「基礎」を謳っているのですが仕方が無いのかもしれませんが、総括的で定まっていない印象があります。毎年開催するのであれば、年によって生命科学の中の分野を順番に変えていっても良いと思います。
- ・ 会場までが遠いので、例えば講義終了後、講師との意見交換会が30分程度用意されている等、会場参加した場合のメリットがあっても良いと思います。
- ・ よく知らない分野をどこにも行かずに簡単に気軽に勉強することができた。資料や本だけではなく、先生のお話を聞くことで理解もしやすかった。
- ・ 基礎と応用の話に少し距離があるように感じた。基礎系の話であれば、その基礎から、研究成果に至るまでの話が聞きたい。その上で、応用として発展的な内容の話が聞ければと感じる。
- ・ スケジュールが合わなくてライブでの講義を聴講できない状況が何度かあり、講義後しばらくの間（1日でも良いので）、オンデマンド配信もしていただければ…と思いました。
- ・ 講義で用いた、分野ごとの有用なサーバー等のリンク集などがあると良いかと思います。
- ・ 私は聴覚障害があるため、講演者の言葉が聞き取れません。今は難しいことかと思いますが、リアルタイムで字幕が出るなら非常にありがたいと思いました。



## アーカイブ公開

公開許可のある講義のみ、共催の理化学研究所計算科学研究センターのホームページ eラーニングアーカイブ (<https://www.r-ccs.riken.jp/about/careers/e-learning/intro-com-life-sci/>) にて公開。

### 計算生命科学の基礎6 バイオメディカルインフォマティクス概論

臨床現場におけるバイオインフォマティクスの役割をのべる。近年臨床現場でバイオインフォマティクスのニーズが急速に高まっている。特に2019年に保険収載予定のがんゲノム検査については、バイオインフォマティクスがエキスパートパネルと呼ばれる専門家会議の必須の構成要員とされている。また、今後臨床研究の広がりが加速するiPS細胞を応用した再生医療等でも細胞のゲノム評価が必須のプロセスである。このように、臨床現場やそれに近い研究の現場でのバイオインフォマティクスの役割について、実際のデータを交えながら解説する。

計算生命科学の基礎6 □

[YouTubeリンク バイオメディカルインフォマティクス概論 \(1\)](#) □

[YouTubeリンク バイオメディカルインフォマティクス概論 \(2\)](#) □

[YouTubeリンク バイオメディカルインフォマティクス概論 \(3\)](#) □



### 計算生命科学の基礎6 (2019)



2019年10月30日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 バイオメディカルインフォマティクス概論</a>
2019年11月6日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 量子化学計算の現在と近未来</a>
2019年11月20日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析</a>
2019年11月27日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 大規模分子系の第一原理計算と量子生命科学</a>
2019年12月4日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 インシリコ創薬支援のための分子シミュレーション活用術</a>
2019年12月11日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 生体系分子シミュレーションの新展開</a>
2020年1月15日	レベル2	<a href="#">計算生命科学の基礎6 プロテオミクスから得られるビッグデータをいかに診断・治療に結びつけるか?</a>



[遠隔インタラクティブ講義]

生命科学のためのシミュレーション技術とデータサイエンス：  
基礎から医療・創薬・健康科学への応用まで

# 計算生命科学の基礎VI

インターネット  
受講

聴講無料  
事前登録制

企画協力：日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

近年、ヒトを含めた生物・生態系とそれを取り巻く環境に関わる大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と、それらを解析するデータサイエンスやシミュレーション技術の進展により、生命科学が大きく変貌を遂げています。実験・観測装置や計算機・情報技術の急速な進歩に伴い、生体分子からマクロ生命系まで、即ち、ゲノムレベルの遺伝情報、タンパク質・核酸の立体構造と相互作用等から細胞レベルの代謝・生理機能や疾患までの高次生命活動の多階層のビッグデータを網羅的かつ定量的に解析し、シミュレーションにより予測して、それらの統合により「生命のしくみ」を根本から理解し、介入することが可能となってきました。ディープラーニングに代表される機械学習・AI技術の発展もそれを後押しし、インシリコ技術を統合的に活用する「計算生命科学」は、現代の生命科学の推進に不可欠な知識基盤を提供しています。そしてその適用領域は、基礎生物学から医学、薬学、健康科学、農学、環境科学、生態学、疫学等の幅広い分野にわたっており、今後、ゲノム医療やデジタルヘルスケアなどの先端技術の基盤としても期待されています。6年目を迎えた今回の遠隔講義では、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、その現状と将来の展望を学んでいただき、基礎から応用までの研究開発を支える人材の育成に寄与することを目指しています。

2019 10.2 水 → 2020 1.29 水

毎週水曜日 [全15回] 17:00-18:30

神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信  
対象：大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者

[担当講師]

- 長尾 知生子 医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬デザイン研究センター インシリコ創薬支援プロジェクト サブプロジェクトリーダー
- 大江 和彦 東京大学大学院医学系研究科 医療情報学分野 教授
- 髙田 雅光 タカラバイオ株式会社 CDMセンター 専門部長
- 瀬々 潤 株式会社ヒューマノーム研究所 代表取締役社長 / 東京医科歯科大学 特任教授 / 産業技術総合研究所 人工知能研究センター 招聘研究員
- 谷嶋 成樹 三菱スペース・ソフトウェア株式会社 関西事業部 バイオメディカルインフォマティクス開発部 部長
- 常田 貴夫 神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授
- 林 重彦 京都大学大学院理学研究科 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
- 田中 成典 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授
- 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
- 池口 満徳 横浜市立大学大学院生命医科学研究科 教授
- 水口 賢司 医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト プロジェクトリーダー
- 朝長 毅 医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬標的プロテオミクスプロジェクト / プロテオームリサーチプロジェクト 上級研究員
- 八木 康史 大阪大学 産業科学研究所 教授
- 水野 敬 理化学研究所 健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム 健康計測解析チーム・新規計測開発チーム チームリーダー

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「京コンピュータ前駅」を降りてすぐ

共催：神戸大学計算科学教育センター、神戸大学学術・産業イノベーション創造本部、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、理化学研究所 生命機能科学研究センター ポスト「京」重点課題1、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、理化学研究所 計算科学研究センター、計算科学振興財団、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究所 後援：兵庫県、神戸市、神戸医療産業都市推進機構、公益財団法人都市活力研究所、NPO法人バイオグリッドセンター関西

▶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VI スケジュール

第1編

## 生命のデータサイエンスから社会実装まで

10.2

[水]

### 構造インフォマティクスの基礎

医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬デザイン研究センター  
インシリコ創薬支援プロジェクト サブプロジェクトリーダー 長尾 知生子

生体内で起こるシグナル伝達や化学反応を理解するためには、その分子的な担い手であるタンパク質の立体構造と分子認識機構を解析する必要があります。本講義では、特異的な相互作用という切り口から、基礎から応用まで、構造インフォマティクスについて解説する。

10.9

[水]

### リアルワールド医療情報から人工知能開発へ

東京大学大学院医学系研究科 医療情報学分野 教授 大江 和彦

電子カルテの普及により臨床現場でのリアルワールド医療データの電子的記録と蓄積が進んでいるが、データの標準化や品質管理面でまだまだ多くの課題もある。一方で、このデータを多施設ビッグデータとして研究開発に活用するプロジェクトがいくつも実施されており、人工知能(AI)システムの開発や医学知見発見への貢献が期待されている。本講義ではこうしたデータ収集とデータ活用状況とそこに内在する課題、そして医療でのAI開発の状況などを概説する。

10.16

[水]

### クリニカルシーケンシングの基礎と実践

タカラバイオ株式会社 CDMセンター 専門部長 島田 雅光

次世代シーケンサーを用いてがん関連遺伝子変異を網羅的に検出し適切な分子標的薬を選択するクリニカルシーケンシングが実践され始めている。本講義では、国内のがんゲノム医療の提供体制とがんパネル検査の状況を紹介します。また、大阪大学医学部附属病院において実施しているクリニカルシーケンシングの実践状況を具体的に紹介し、クリニカルシーケンシングの実施の必要要件とパイオインフォマティクスの役割を解説する。

10.23

[水]

### 機械学習・人工知能技術入門

株式会社ヒューノーム研究所 代表取締役社長/  
東京医科歯科大学 特任教授/  
産業技術総合研究所 人工知能研究センター 招聘研究員 瀬々 潤

生命科学において計測されるデータを解析することで、基礎面では生命の理解、応用面では医療、創薬、薬学、農学へと繋がる期待は高い。本講義ではこれらの解析の基礎となる機械学習や数理統計技術の説明にはじまり、人工知能の導入を解説する。また、人工知能と現在の産業との関わりや計算生命科学の応用に関する重要性を紹介する。

10.30

[水]

### バイオメディカルインフォマティクス概論

三菱スペース・ソフトウェア株式会社 関西事業部  
バイオメディカルインフォマティクス開発部 部長 谷崎 成樹

臨床現場におけるパイオインフォマティクスの役割をのべる。近年臨床現場でパイオインフォマティクスのニーズが急速に高まっている。特に2019年に保険収載予定のがんゲノム検査については、パイオインフォマティクスがエキスパートパネルと呼ばれる専門家会議の必須の構成要素とされている。また、今後臨床研究の広がりが加速するiPS細胞を応用した再生医療等でも細胞のゲノム評価が必須のプロセスである。このように、臨床現場やそれに近い研究の現場でのパイオインフォマティクスの役割について、実際のデータを交えながら解説する。

第2編

## 構造生命科学のための分子シミュレーション

11.6

[水]

### 量子化学計算の現在と近未来

神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授 常田 貴夫

量子化学計算は反応解析や材料設計の実験検証に不可欠な手段となっている。その主要理論が密度汎関数法(DFT)であり、現在9割を超える量子化学計算で利用されている。DFTは化学を取り扱うために精度を高め、従来の量子化学では困難とされてきた問題を続々解決してきた。近年、DFTをさらに発展させる可能性がある要素としてデータ科学が注目を集めている。本講義では、最新のDFTとデータ科学の導入による発展の可能性について紹介する。

11.13

[水]

### ハイブリッドQM/MM法による生体分子機能解析

京都大学大学院理学研究科 教授 林 重彦

酵素活性や生体情報・エネルギー変換など、生体分子の顕著な分子機能では、局所的な反応活性中心部位の触媒化学反応が大域的な機能的分子構造変化と相関するようになり達成されている。そのような大きな生体分子中における化学反応解析を可能にするのがハイブリッドQM/MM法である。本講義では、ハイブリッドQM/MM法の理論的背景を概説し、それを用いた生体分子機能に関する研究を紹介する。

11.20

[水]

### 溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析

大阪大学基礎工学研究科 化学工学領域 教授 松林 伸幸

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揮する。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系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、溶媒と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。

11.27

[水]

### 大規模分子系の第一原理計算と量子生命科学

神戸大学大学院システム情報学研究科 教授 田中 成典

量子力学に立脚した第一原理電子状態計算は、生体分子系の関わる相互作用や励起ダイナミクスを定量的に記述する上での基礎となる。本講義では、生体分子系の量子化学計算アプローチの一つとしてフラグメント分子軌道法の基礎と応用を紹介するとともに、近年注目を集めている「量子生命科学」への展開についても触れる。生命系において「量子性」を論じることの意味・意義について、様々な観点から、できるだけ簡明に述べたい。

12.4

[水]

### インシリコ創薬支援のための分子シミュレーション活用法

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 広川 貴次

クライオ電顕をはじめとするタンパク質立体構造解析技術の発展により、構造データを起点とした創薬支援研究が再び注目されてきている。しかし、構造データの中には、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基礎と応用例について紹介する。

第3編

## ビッグデータ・AIの健康科学への活用

12.11

[水]

### 生体系分子シミュレーションの新展開

横浜市立大学大学院生命医科学研究科 教授 池口 満徳

生体系の分子シミュレーションは、生体分子の立体構造に基づく機能理解(創薬等も含)によく用いられており、コンピュータの性能が上がるにつれ、その適用範囲は拡大を続けている。日本でも、「京」の次のスーパーコンピュータ「富岳」の構築が始まり、今後の活用が期待が持たれている。本講義では、ポスト「京」と呼ばれていた「富岳」での生体系分子シミュレーション研究の展望や人工知能技術との連携などについて解説する。

12.18

[水]

### 健康・医薬研究の基盤としてのデータ統合と人工知能活用

医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト  
プロジェクトリーダー 水口 賢司

コンピュータフレンドリーな形に整理されたデータをどれだけ利用できるかが、人工知能の成否に大きな影響を与える。本講義では、マイクロバイームデータ解析や薬物動態モデリングなどの具体例を用いて、データ統合とデータベース構築の重要性について、さらに社会実装に向けた試みを議論する。

1.15

[水]

### プロテオミクスから得られるビッグデータをいかに診断・治療に結びつけるか?

医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬標的プロテオミクスプロジェクト/  
プロテオームリサーチプロジェクト 上級研究員 朝長 毅

プロテオミクス技術の飛躍的進歩により、1回の解析から万単位のタンパク質・リン酸化タンパク質の同定・定量情報が得られる時代になった。本講演では、そのプロテオームビッグデータをいかに病気の診断や治療に応用するかについて、我々が現在取り組んでいる、がんの早期診断法およびオーダーメイド治療法の開発を中心に紹介したい。

1.22

[水]

### 歩き方からわかること~個人認証から健康長寿まで~

大阪大学 産業科学研究所 教授 八木 康史

画像処理の分野においては、人の歩き方から個人を認証することを歩容認証「Gait recognition」という。歩容認証は、個人毎で体型や動きが異なることに着目した個人認証技術で、自治体・警察支援によるスーパー防犯灯、商店街、スーパー等における防犯カメラなど、さまざまな場所に設置された防犯カメラ映像から、容疑者を特定する技術として期待されている。では、どうやって個人認証を行うのか。本講演では、我々が提案する歩容認証技術の概要と課題、さらに、歩容を使った新たな応用である健康利用について紹介する。

1.29

[水]

### ヘルスケアビッグデータ解析により開発した健康関数

理化学研究所健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム  
健康計測解析チーム/新規計測開発チーム チームリーダー 水野 敏

「健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス」(https://rc.riken.jp/)は、より正確な健康維持・増進への指針、つまり将来にわたり健康で「生き活き」とした人生を送っていく上での「羅針盤」の提供を目指している。そのために、主に疲労科学の知見に基づく健康計測項目を定め、2,000人以上のヘルスケアビッグデータを取得し、健康増進一疾患発症前段階の未病状態と、健康度を精緻に把握するための新しい概念「健康関数」の開発を行った。本講演では健康関数開発状況と未病克服のためのソリューション開発の応用など今後の活用法について紹介したい。

[コーディネーター] 白井 剛(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)、伊藤 真里(医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト 上席研究員)、田中 成典(神戸大学大学院システム情報学研究科 教授)、森 一郎(神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授)、江口 至洋(神戸大学学術・産業イノベーション創造本部 客員教授)、渡邊 博文(神戸大学計算科学教育センター 研究員)

### 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\\_science6/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science6/)

### 受講方法

講義は神戸大学計算科学教育センターで行ない、インターネットを通じて中継する会議システムWebexを使用しています。直接受講する以外にどこからでもオンライン受講が可能です。

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



## 大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会 (AXIES2019)

### 概要

大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会 (AXIES2019) (2019/12/12 福岡国際会議場) で「神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」の 2018 年度報告」というタイトルで講演し、本講義の実施状況、課題等について報告した。

### 大会について

3 日間の来場者数は、1,321 名 (大学関係者 531 名、企業関係者 395 名、口頭発表 76 件、ブース出展機関 65 機関 (81 ブース))

[開催日時] 2019 年 12 月 12 日 (木) ~14 日 (土)

[会場] 福岡国際会議場 〒812-0032 福岡県福岡市博多区石城町 2-1

[主催] 一般社団法人 大学 ICT 推進協議会

[共催] 国立大学法人 九州大学

[後援] 文部科学省、福岡県、福岡市、福岡県教育委員会、福岡市教育委員会、一般社団法人  
情報処理学会

[参加対象者] 高等教育機関及び学術研究機関において、情報通信技術を利用した教育、研究、経営等に携わる教職員。高等教育機関向け ICT 活用製品を提供する企業。  
大学 ICT 推進協議会の会員非会員機関に関わらず参加可能。

[開催趣旨] 大学 ICT 推進協議会の目的である我が国の高等教育機関及び学術研究機関における情報通信技術を利用した教育、研究、経営等の高度化を図り、もって我が国の教育、学術研究、文化及び産業の発展に寄与するために、会員ならびに国内の高等教育・学術研究機関間で、各種専門的情報の提供ならびに交換を行います。

### 口頭発表

タイトル：神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」の 2018 年度報告

発表者：横川 三津夫 (神戸大学)

## 神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」 2018 年度報告

鈴木洋介<sup>1)</sup>, 渡邊博文<sup>1)</sup>, 石野麻由子<sup>1)</sup>, 土井陽子<sup>2)</sup>, 倉仁美<sup>1)</sup>, 江口至洋<sup>3)</sup>,  
田中成典<sup>1)</sup>, 鶴田宏樹<sup>3)</sup>, 白井剛<sup>4)</sup>, 森一郎<sup>5)</sup>, 伊藤真里<sup>6)</sup>, 臼井英之<sup>1)</sup>, 横川三津夫<sup>1)</sup>

- 1) 神戸大学計算科学教育センター
  - 2) 理化学研究所生命機能科学研究センター
  - 3) 神戸大学学術・産業イノベーション創造本部
  - 4) 長浜バイオ大学バイオサイエンス学部
  - 5) 神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科
  - 6) 医薬基盤・健康・栄養研究所バイオインフォマティクスプロジェクト
- suzuki@ferret.kobe-u.ac.jp

### Annual Report on Interactive Distance Learning “Introduction to Computational Life Science” Broadcasted from Kobe

Yosuke Suzuki<sup>1)</sup>, Hirofumi Watanabe<sup>1)</sup>, Mayuko Ishino<sup>1)</sup>, Yoko Doi<sup>2)</sup>, Hitomi Kura<sup>1)</sup>  
Yukihiro Eguchi<sup>3)</sup>, Shigenori Tanaka<sup>1)</sup>, Hiroki Tsuruta<sup>3)</sup>, Tsuyoshi Shirai<sup>4)</sup>,  
Ichiro Mori<sup>5)</sup>, Mari Ito<sup>6)</sup>, Hideyuki Usui<sup>1)</sup>, Mitsuo Yokokawa<sup>1)</sup>

- 1) Education Center on Computational Science and Engineering, Kobe University
- 2) Center for Biosystems Dynamics Research, RIKEN
- 3) Office for Academic and Industrial Innovation, Kobe University
- 4) Department of Bioscience, Nagahama Institute of Bio-Science and Technology
- 5) Graduate School of Science, Technology and Innovation, Kobe University
- 6) Laboratory of Bioinformatics, National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

#### 概要

生物の大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と、それに促されたシミュレーション科学, 人工知能, データサイエンスなどの研究分野の進展やそれらの綿密な連携により, コンピュータを活用した計算生命科学の研究分野は, 今日, 急速に変革を遂げつつある。計算生命科学は, 計算科学と医農工理学分野が融合した学際的研究領域であり, 今後, 様々な研究分野や産業界等への研究の拡がり期待されているため, 包括的な基礎知識を習得する機会が求められている。神戸大学計算科学教育センターは, 関係諸機関と協力して, 遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」シリーズを 2014 年から全国に配信を開始し, 2018 年度は 748 名の受講登録を受け付けた。本稿では, 2018 年度に実施した「計算生命科学の基礎 V」と, 最近注目されているディープラーニングに焦点を当て特別編として実施した「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル 2」の開催結果について報告する。

#### 1 はじめに

現代の生命科学は, 急速な変革を遂げつつある。その変革は, 生物のゲノム情報, RNA 配列情報, タンパク質構造などの大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と, シミュレーション科学, 人工知能, データサイエンスなどの研究分野の進展, 及びそれらの連携を促しているスーパーコンピュータを活用した「計算生命科学」の大きな進展に依るところが大きい。計算生命科学は, ゲノムの遺伝情報, 生体分子の立体構造と相互作用, 細胞レベルの代謝・

生理や疾患までの高次生命活動の高階層のビッグデータを定量的かつシステムティックに解析し, 計算機シミュレーションにより予測し, それらを統合することにより生命を理解することを目指す学問分野である。その急速な進展は農学や医学の分野にも大きな影響を及ぼし, 創薬や有用物質の生産やゲノム医療などへの応用が期待されており, アカデミアだけでなく産業界からも大きな注目を集めている。

しかし, この研究分野は急速に進展しているため, 網羅的に最先端の研究の現状を把握する場や, 研究分

野全体を俯瞰する機会が無かった。このため、神戸大学計算科学教育センター(ECCSE)、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、理化学研究所生命機能科学研究センター ポスト「京」重点課題 1[1]、理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)などの共催により、この研究領域の第一線で活躍されている著名な研究者の方々によるインターネットを利用した遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」シリーズを、2014年から開講し、インターネットで配信している[2]。過去5回のシリーズでは、生命科学のデータベース、統計学、バイオインフォマティクス、およびシミュレーション科学と多岐に亘る講義を配信し、計算生命科学の現状を知る良い機会であるとの評価を頂いた。詳しくは開催報告書[3,4]を参照して欲しい。また、本遠隔講義に関する取り組みについては、大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会、2018 年度年次大会で報告したところである[5,6]。

本稿では 2018 年度に実施した「計算生命科学の基礎 V」と、ディープラーニングに焦点を当てた特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」の開催結果について報告する。

なお、6 年目となる今年度もデータサイエンスに関わる講義を拡充させ、2019 年 10 月より遠隔講義配信を開始した [7]。

## 2 講義概要

本遠隔インタラクティブ講義は、10 月から1月までの期間、毎週同じ曜日(2014 年度、2016 年度は火曜日、2015 年度、2017 年度、2018 年度は水曜日)の 17:00 - 18:30 の 90 分間、インターネットを使った配信により、計 15 回の講義を提供した。配信環境としては 500 台の端末(PC もしくはスマートフォン)まで同時配信可能な Cisco 社の Webex Events Event 500 を用いている。これは主催側 PC から講義の模様を映像や音声により受講者の PC へ配信し、さらに講義用スライド画面を受講者の PC から共有することができるシステムである。受講者は主催者から送られる URL に Web ブラウザを用いてアクセスすることによって受講できる。おおむね安定して講義の配信を行うことができている。

受講者側 PC からは、Webex のチャット機能により講義に対する質問などを主催者側 PC に送ることが可能であり、この機能を利用して講義終了時に質疑応答の時間を設けている。さらに一部の講義については、その模様をアーカイブ化した映像を、R-CCS の Web サイトで公開している[8]。

受講者の募集は、ポスターやチラシの配布、学会のメーリングリスト、過去の受講者へ呼びかけ、共催組織の Web site などで行った。受講申込は、ECCSE の Web サイトの登録用フォームから行えるようにした。

## 3 2018 年度「計算生命科学の基礎 V」

5 年目となる 2018 年度は、2018 年 10 月 3 日から 2019 年 1 月 23 日にかけて 15 回実施した。受講登録者は 748 名となり過去最多を更新した(1 年目 262 名、2 年目 464 名、3 年目 550 名、4 年目 612 名)。本講義について、より広く知られてきた結果であると考えている。

15 回の講義は、「ゲノムから分子構造までの計算生命科学の基礎と実践」、「構造生命科学のための分子シミュレーション」、「健康科学・医療・創薬への応用」の三編構成とした。また、最新の話題である人工知能関連の話題やデータサイエンスの話題を取り入れた。各回の実際の受講者数も人工知能関連の講義では比較的多かった。

受講登録者の所属は図1のとおりである。企業関係者が半分以上を占めている。この傾向は昨年度までと同様である。企業が求めていることとも、講義の内容がマッチングしているためと考えられる。

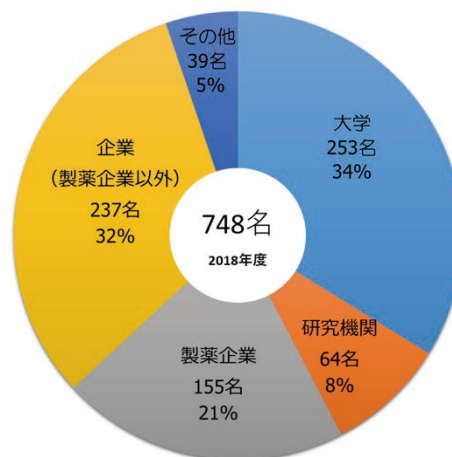


図1 2018 年度「計算生命科学の基礎 V」受講登録者の所属分布

次に、大学関係者の全国分布を図2に示す。全国の31都道府県の72大学から253名の受講者の登録があった。



図2 2018年度「計算生命科学の基礎V」の大学所属の受講登録者の全国的な広がり

([https://d-maps.com/carte.php?num\\_car=24851&lang=ja](https://d-maps.com/carte.php?num_car=24851&lang=ja)をもとに作成)

図3に、各講義の聴講申込数と実際に聴講した数を示す。企業関係の申込者が多いため、配信時には用務を優先される者が多かったものと考えられる。最大同時受講者数は第3回目の288名であった。

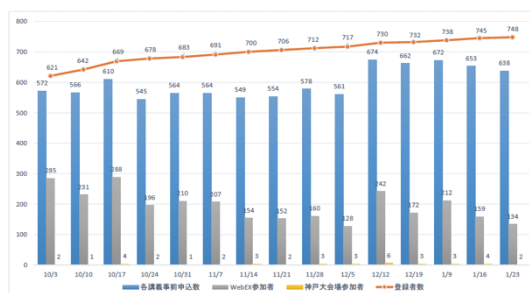
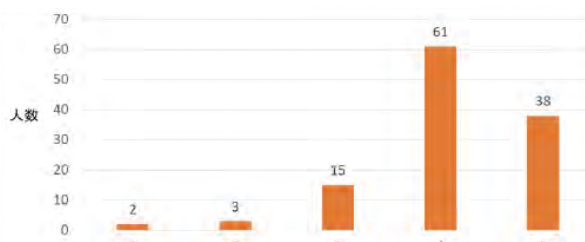


図3 各講義の聴講申込数と実際の聴講者数

最後に、受講者の受講後の評価について述べる。受講後、Web、またはメールを介してアンケートを行った結果、受講登録者748名中119名の回答を得た。全体的な評価については、1を「期待はずれだった」、5を「とても良かった」として1から5の5段階で評価してもらった。「良かった」、「とても良かった」の割合が83%と大変高い評価が得られた(図4)。



1 期待外れ → 5 とても良かった

図4 2018年度「計算生命科学の基礎V」遠隔講義全体の評価(アンケート結果):5を最高、1を最低とした5段階評価

講義全体への感想は以下の通りである。

- 統計、データ分析関連の知識がまとめて勉強できる場だったのでとてもありがたい。
- 遠隔で行っている講義が少ない中、このような遠隔地で受講できるようになれば、年齢、地域、その他の事情に左右されない教育の普及につながりそうに感じた。
- 最新の分子シミュレーションの手法について知ることが出来た。
- 総論から専門分野に至る過程を話して頂いた講義は非常に分かりやすかった。

講義を知人にも勧めたいという声も多くあった。実際、アンケートで受講のきっかけを聞いたところ、知人からの紹介でこの講義を知ったという回答が約20%となっている。

一方で、映像や音声トラブルや、インストール時のトラブルに関する指摘もあった。配信トラブルについては、配信場所(ECCSE)から各個人のPC環境へのネットワーク接続速度の影響が大いに考えられ、やむを得ないかもしれないが、今後も改善できるよう努力したい。

## 5 特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」

AIやディープラーニング、機械学習といった手法が今、大きな注目を浴びており、計算生命科学分野においても例外ではなく、講義だけではなく、実際にPCを用いて体験したいという要望があった。

2017年に引き続き、主として初心者向けに生命科学におけるディープラーニングをテーマにした特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」を実施した。特別編の構成は、講義「生命科学分野における深層学習技術」(90分)と、実習「Python + TensorFlowによる学習」の2部構成である。講義では、化合物構造グラフを扱うGraph convolution技術やタンパク質立体構造を扱う3次元畳み込みネットワークなど、創薬応用を中心と



した生命科学分野向けの最新の深層学習技術に関する解説が行われた。実習では、AI分野で良く用いられるPythonとTensorFlowを取り上げ、ニューラルネットワークによる予測モデルの作成を実際に行ってみた。ケムインフォマティクス分野では、フィンガープリントを用いた化合物の薬物動態パラメータに対する予測モデルの作成や、バイオインフォマティクス分野ではペプチドの2次構造予測の初歩的な問題に取り組んだ。

終了後のアンケートでは、おおむね良好な回答が多かった。特に実習に関しては、「ディープラーニングの基礎と仕組みが分かった」、「深層学習を行える環境を自分のPCに整備できたことは、大変助かった」などの意見を頂いた。

受講の募集は、遠隔インタラクティブ講義の募集とは別に行っており、ポスターやチラシによる案内はなく、メーリングリストやWebサイトによるものだけで行った。申し込みの期間も通常編よりは短かったが、特別編への関心は高く、全体で246名の申し込みがあった。実習は先着で申し込みを締め切り19名で実施した。講義は従来通りWebexを用いたインターネット配信を行ったが、実習の配信は行わず、受講者に会場に来ていただいて実施した。

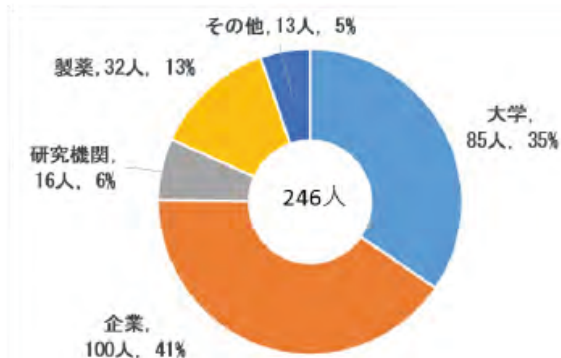


図5 2018年度「特別編」講義受講者の所属分布

受講者の所属を見ると、例年の遠隔講義とあまり変わらない構成だった(図5)。

## 6 まとめ

本報告では、2018年度に実施した遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎V」及び特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」の実施状況についてまとめた。これまでの5年間分の講義及び特別編を合わせると延べ3000名の受講者登録があり、その講義内容については、多くの受講者から高い評価を頂いている。

2019年10月2日からは、計算生命科学の基礎VIを実施しているが、2020年度以降は、継続的な運営のための資金確保や運営体制など解決しなければならないいくつかの課題がある。

これまで遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」で対象としている分野は、現在も急速に発展しており、よりニーズの高い取り組みを紹介していただいているという産業界からの期待も大きい。

このような期待に応えられるよう2020年度以降も継続の努力を続けていく。

### 謝辞

本遠隔講義の実施に当たっては、多くの方々にご協力頂いた。また、兵庫県及び神戸市の研究教育拠点(COE)形成推進事業の一環として理化学研究所計算科学研究センターの人材育成事業の支援を頂いている。ここに記して感謝申し上げます。

### 参考文献

- [1] ポスト「京」重点課題1サイト  
<http://scidd.riken.jp/>
- [2] 遠隔講義一覧  
[http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance\\_learning/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/)
- [3] 神戸大学計算科学教育センター編「開催報告書：遠隔インタラクティブ講義 計算生命科学の基礎 2014年度・2015年度・2016年度, 2017.  
<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/news/1985>
- [4] 神戸大学計算科学教育センター編「開催報告書：遠隔インタラクティブ講義 計算生命科学の基礎 2017年度・2018年度, 2019.  
<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/news/content.html>
- [5] 渡邊博文, 鈴木洋介, 近藤洋隆, 石野麻由子, 土井陽子, 江口至洋, 田中成典, 鶴田宏樹, 白井剛, 森一郎, 臼井英之, 横川三津夫, 神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」, 大学ICT推進協議会 2017年度年次大会論文集, TF1-2, 2017.
- [6] 鈴木洋介, 渡邊博文, 八木学, 石野麻由子, 土井陽子, 江口至洋, 田中成典, 鶴田宏樹, 白井剛, 森一郎, 臼井英之, 横川三津夫, 神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」の2017年度報告, 大学ICT推進協議会 2018年度年次大会論文集, MB1-3, 2018.
- [7] 「計算生命科学の基礎VI」受講申込サイト  
[http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance\\_learning/life\\_science6/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science6/)
- [8] 「計算生命科学の基礎V」理研 e-ラーニングアーカイブサイト  
[http://www.r-ccs.riken.jp/jp/course/course-base\\_2018](http://www.r-ccs.riken.jp/jp/course/course-base_2018)

2020年度  
計算生命科学の基礎VII



## 目的

生命科学は、計算科学（シミュレーション・統計学・構造科学・ディープラーニング・AI など）が融合することにより、加速的に発展しつつあります。さらに、この知識の融合は「計算生命科学」として、創薬分野、農学や医学、健康関連分野に多様性をもたらし、アカデミア・産業界のイノベーションの推進力となっています。本講義では、バイオインフォマティクス、生命科学データベース、統計学およびシミュレーション科学そしてAI やディープラーニングの活用など多岐にわたる入門的な講義を配信してきました。7年目を迎える今年度は「生命科学のためのシミュレーション技術とデータサイエンス：基礎から医療と人工知能の融合領域へ」と題して、生命のデータサイエンスの基礎に始まり、分子シミュレーション、AI を医療分野に活用している最新事例を取り上げます。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、その現状と将来の展望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。

## 対象

大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者

## 共催、後援、協力

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、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、産業技術総合研究所 細胞分子工学研究部門、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科、理化学研究所 医科学イノベーションハブ推進プログラム、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、公益財団法人都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西  
日本薬学会

企画協力： CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

## 運営体制

### ▼企画コーディネーター

伊藤 眞里（医薬基盤・健康・栄養研究所 バ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 量子生命科学領域グループリーダー）

白井 剛（長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授）

田中 成典（神戸大学大学院システム情報学研究科 教授）

森 一郎（神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授）

森 義治（神戸大学大学院システム情報学研究科 講師）

八幡 憲明（量子科学技術研究開発機構 量子生命科学領域グループリーダー）

#### ▼配信・運営担当

- 臼井 英之（神戸大学計算科学教育センター）
- 横川 三津夫（神戸大学計算科学教育センター）
- 近藤 洋隆（合同会社 VRAIDE／関西大学先端科学技術推進機構）
- 土井 陽子（京都大学大学院医学研究科ビッグデータ医科学分野）
- 倉 仁美（神戸大学計算科学教育センター）

#### 開催日程

2020年10月7日～2021年2月3日 毎週水曜日、全15回 17:00-18:30

#### 講義会場

神戸大学計算科学教育センター セミナー室（兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-48）  
※新型コロナウイルス感染症防止のため、15回中3回\*のみ上記会場からの配信  
その他12回は、講師所属先からの直接配信となり、会場での開催はなし

#### インターネット講義配信

インターネット会議システムサービス「Webex」を使用し、所属先に在籍する講師の講義を神戸大学事務局を介して、全国の受講生に配信した。（新型コロナウイルス対応のため）

#### 担当講師

- ・竹本 和広（九州工業大学 大学院情報工学研究院 生命化学情報工学研究系 准教授）
- ・中村 周吾（東洋大学情報連携学部 教授）
- ・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）
- ・有田 正規（情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所 教授）
- ・渡辺 亮（京都大学 大学院医学研究科 特定准教授）
- ・関嶋 政和（東京工業大学 情報理工学院 准教授）
- ・Standley, Daron（大阪大学 微生物病研究所 教授）\*
- ・広川 貴次（産業技術総合研究所 上級主任研究員／筑波大学 教授）\*
- ・高田 彰二（京都大学 大学院理学研究科 教授）
- ・緒方 法親（株式会社日本バイオデータ 代表取締役／次世代バイオ医薬品製造技術研究組合 事業部 顧問（ゲノム技術））\*
- ・上田 修功（理化学研究所革新知能統合研究センター 副センター長）
- ・荒牧 英治（奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授）
- ・森本 淳（理化学研究所 バトンゾーン研究推進プログラム ロボティクスプロジェクト 人間機械協調研究チーム チームリーダー）
- ・鎌田 春彦（医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬デザイン研究センター バイオ創薬プロジェクト プロジェクトリーダー）
- ・鎮西 清行（産業技術総合研究所 健康医工学研究部門 副研究部門長）

<p><b>第1編 生命のデータサイエンスの基礎</b></p>
<p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. アルバート・ラズロ バラバシ (池田裕一ら訳), 「ネットワーク科学」 共立出版, 2019年 (原著オンライン版 <a href="http://networksciencebook.com">http://networksciencebook.com</a>)</li> <li>2. Takemoto, K. Current understanding of the formation and adaptation of metabolic systems based on network theory. <i>Metabolites</i>, vol. 2, issue 3, pp. 429-457 (2012).</li> <li>3. 江口至洋「細胞のシステム生物学」共立出版, 2008年 4. ゲノム創薬科学 (田沼靖一編集), 裳華房, 2017.</li> <li>4. 長田直樹, 「進化で読み解く バイオインフォマティクス入門」 森北出版, 2019</li> <li>5. Raschka, Mirjalili 著, 福島監訳, 「Python 機械学習プログラミング 達人データサイエンティストによる理論と実践」 インプレス, 2018</li> <li>6. 著者: 齊藤和季, 「植物メタボロミクス (シリーズ・生命の神秘と不思議)」 裳華房</li> <li>7. 「基礎から学ぶマスペクトロメトリー」 MSSJ ウェブサイトより公開 <a href="http://www.mssj.jp/publications/journal_jp/kaisetsu_series_01.html">http://www.mssj.jp/publications/journal_jp/kaisetsu_series_01.html</a></li> <li>8. 著者: J.H. Gross, 「マスペクトロメトリー 原書3版 (日本語版)」 丸善出版</li> <li>9. 「医学のあゆみ メタボローム解析 UPDATE」 2019年 270巻5号</li> <li>10. 質量分析インフォマティクス研究会 <a href="http://ms-bio.info/index.html">http://ms-bio.info/index.html</a></li> <li>11. 渡辺亮・鈴木穰編, 「シングルセルゲノミクス」 羊土社</li> </ol>
<p><b>1.1 「代謝ネットワーク解析: 基礎と応用」 (担当: 竹本 和広)</b></p>
<p>代謝は一連の生化学反応の総称であり、学術的側面はもちろんのこと医学・農学・環境学などの応用的側面においても興味深い。特に、代謝はしばしばネットワークの視点から解析される。ここでは、そのような代謝ネットワーク解析について紹介する。基礎から始め近年の動向についても紹介する。特に、進化解析、メタボローム相関ネットワーク解析、標的化合物合成経路の列挙・探索、未知反応経路予測、Reverse Ecology などについて触れる。</p>
<p><b>1.2 「機械学習・深層学習と生命科学」 (担当: 中村 周吾)</b></p>
<p>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、ゲノム塩基配列やアミノ酸配列に機械学習・深層学習の方法を適用するインフォマティクス解析、分子構造を対象としたシミュレーション解析などが行われてきた。本講義では、社会全体に急速に応用が広がっている機械学習・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、実例を交えて紹介する。</p>
<p><b>1.3 「タンパク質構造インフォマティクス基礎」 (担当: 富井 健太郎)</b></p>
<p>タンパク質の配列・立体構造データの蓄積に伴い、データ駆動型アプローチの重要性がますます高まってきている。本講義では、タンパク質立体構造の全体的および局所的比較を軸に、構造インフォマティクス技術の基礎と役割を紹介する。また応用事例として、産総研人工知能研究センターで開発しているデータベースなどを紹介する。</p>

<b>1.4 「質量分析インフォマティクスの基礎」 (担当：有田 正規)</b>
<p>メタボローム解析、メタボロミクス、リピドミクスと呼ばれる分野では、スペクトルの抽出、検索、代謝物の同定等において計算機をフル活用する。しかしゲノム解析に比較すると未整備な部分が多く、分野の概観が難しい。本講義では、質量分析の仕組み、化合物構造の表現方法、同定の基準など、基本的な情報解析の流れを解説する。NMRによる解析には触れず、タンデム質量分析計に基づいた解析を中心に紹介する。</p>
<b>1.5 「細胞レベルでの解体新書「シングルセルゲノミクス」」 (担当：渡辺 亮)</b>
<p>シングルセルゲノミクスは、従来の組織学的な細胞分類では見えなかった新規の細胞種の同定を可能にし、ヒトの初期発生など入手困難なサンプルにおける細胞状態の変化を明らかにしている。複数の細胞状態への変化を検出することで分化の分岐点を決定し、我々の体をつくりだす細胞運命決定機構の分子メカニズムに迫ることができる。さらに、シングルセルレベルでのTCR/BCRの配列決定法が従来のレパトア法にとって変わろうとしている。本講義ではシングルセル解析の現状を紹介する。</p>
<b>第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション</b>
<p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. R. Yoshino et al., "In silico, in vitro, X-ray crystallography, and integrated strategies for discovering spermidine synthase inhibitors for Chagas disease", <i>Scientific Reports</i>, 7, doi:10.1038/s41598-017-06411-9, 2017.</li> <li>2. N. Yasuo and M. Sekijima, "Improved Method of Structure-Based Virtual Screening via Interaction-Energy-Based Learning", <i>Journal of Chemical Information and Modeling</i>, 59 (3), pp. 1050-1061, DOI: 10.1021/acs.jcim.8b00673, 2019.</li> <li>3. <a href="https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2019/me/c9me00020h">https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2019/me/c9me00020h</a></li> <li>4. 樋口知之 編著, 「データ同化入門」朝倉書店</li> <li>5. ビショップ, 「パターン認識と機械学習 (上下)」丸善出版</li> </ol>
<b>2.1 「新型コロナウイルス感染症治療薬探索を目指したシミュレーションと機械学習」 (担当：関嶋 政和)</b>
<p>現在、新型コロナウイルス感染症は、世界的に大きな問題になってきている。小康状態に仮に落ち着いたとしても、第2波や、SARS-CoV-3のような更に新しいコロナウイルスが広がる可能性も考えられる。COVID-19のような感染症には、長い時間をかけた準備が出来ないため、リポジショニングのような、既に知られている薬剤の転用が重要であるが、我々は、このような時代に、どのようなシミュレーション手法と機械学習手法が貢献可能かを実例と共に考えてみたい。</p>
<b>2.2 「Analysis of antibody-antigen interactions from sequence data」 (担当：Standley, Daron)</b>
<p>Antibodies are the soluble portion of B cell receptors (BCRs). Since antibodies are a critical part of our immune system's defense against disease, there is growing interest in identifying BCR sequences associated with specific disease-related antigens. In the recent COVID-19 pandemic, for example, a number of groups reported antibody sequences against the SARS-CoV-2 spike protein</p>

<p>within months of the outbreak (Brouwer, et al., 2020; Cao, et al., 2020; Chi, et al., 2020). Structure determination of antibody-antigen complexes is a low throughput task, so there is a need for computational methods that can characterize the epitopes of disease-specific antibodies from sequence information alone.</p>
<p><b>2.3 「分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬支援」 (担当：広川 貴次)</b></p> <p>クライオ電顕をはじめとするタンパク質立体構造解析技術の発展により、構造データを起点とした創薬支援研究が再び注目されてきている。しかし、構造データの中には、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基礎と応用事例について紹介する。</p>
<p><b>2.4 「分子シミュレーションと計測データの融合」 (担当：高田 彰二)</b></p> <p>今日、分子シミュレーションはタンパク質等の分子動態研究・創薬研究の一方法として普及している。しかし、シミュレーションが実験にとって代わるわけではない。むしろ実験データと融合することで分子シミュレーションは更に役に立つ。その一般的枠組みは、ベイズ統計学に基づいたモデル構築(ベイズモデリング、機械学習のひとつ)によって与えられる。講義では、その枠組みを概説し、具体例を紹介する。</p>
<p><b>第3編 医療と人工知能の融合領域</b></p>
<p>[参考図書]</p> <p>(講義 3.1 については多数の参考図書があるため、詳細はホームページ (<a href="http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science7/">http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science7/</a>) を参照)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 「アリストテレス全集 8/動物誌(上)」岩波書店, ISBN 978-4-00-092778-9, p.156, p.158</li> <li>2. デイヴィッド・サルツブルグ, 「統計学を拓いた異才たち」日経ビジネス人文庫, ISBN 978-4-532-19539-7</li> <li>3. NGS(Illumina) <a href="https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/18516045/">https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/18516045/</a></li> <li>4. 石井健一郎、上田修功, 「続・わかりやすいパターン認識(教師無し学習入門)」 オーム社</li> <li>5. Pang-Ning Tan, Michael Steinbach, and et al., 「Introduction to Data Mining (2nd Edition) (What's New in Computer Science)」 Person press, 2018.</li> <li>6. 荒牧英治, 「医療言語処理」コロナ社</li> <li>7. 「神経科学の最前線とリハビリテーション—脳の可塑性と運動」</li> <li>8. 「標的に抗体が結合できる部位はいくつあるか？」 実験医学, vol.36 (11) 1867-1874. 2019</li> <li>9. 「医用画像ディープラーニング入門(医療AIとディープラーニングシリーズ)」 ISBN 78-4-274-22365-5</li> </ol>
<p><b>3.1 「計算によって「何かが説明できる」という信念が迫り来る未知のウイルスに出会ったとき」 (担当：緒方 法親)</b></p> <p>計算は古来より生命科学に貢献してきた。アリストテレスは家畜乳の成分比較に計算を用いたし、統計学・検定はフィッシャーが農場で開発したものである。それでも計算生命科学に新鮮味があるのは、測定装置の飛躍的な性能向上によって生命科学における計算の重要性が増したからだろ</p>



う。データがシェアされる今日では、居間で計算することによって動物研究の再現性を植物で調べ、新興ウイルスの性質を調べることができる。講義では事例と共に計算生命科学発展のカギを探る。

### 3.2 「AI 医療の最新活用事例」 (担当：上田 修功)

近年、AI (機械学習) 技術は、工学のみならず、自然科学、社会科学分野においても多用され、AI 技術への関心が高まっている。本講義では、AI 技術の医療応用に関し、我々が取り組んでいる最新の活用事例である、前立腺癌の術後の再発予測手法、および、創薬ターゲット探索のための患者層別化手法について紹介する。具体的には、両方で用いている AI 技術の詳細を各々説明し、その有用性を紹介する。

### 3.3 「自然言語処理が拓く医療 AI の未来」 (担当：荒牧 英治)

今、医療現場が変わりつつある。電子カルテに集積される医療ビッグデータ、それを生かした人工知能による診断支援、さらには、スマートフォンやスマートスピーカーといった新たなデバイスからの患者情報など、様々な材料、技術が登場している。

しかし、生成される多様なデータの相当な部分は自然言語文であり、今後もそれはただちに変わりにくい。つまり、医療データの利活用には、この自然言語文を扱う技術が必須となる。講義では、カルテビッグデータを用いた診断支援、つぶやきを用いた感染症流行推定、スマートデバイスで患者の声を集める試みなど、進行中の研究テーマの概要を具体的に説明し、議論したい。

### 3.4 「運動意図推定とロボットリハビリテーション」 (担当：森本 淳)

少子高齢化の社会的背景から、日本をはじめとした先進諸国においてロボティクス技術を用いた運動アシストシステムの開発が盛んとなっている。ここでは、外骨格ロボットをはじめとした運動アシスト技術のこれまでの発展を概説するとともに、私たちの研究グループにおける、運動意図推定手法をはじめとした研究開発やリハビリテーション応用の活動について紹介する。

### 3.5 「抗体医薬の分子デザインに叶う計算生命科学の可能性」 (担当：鎌田 春彦)

現在、中和活性や細胞傷害活性などの、様々な機能を持つ抗体が画期的な効果を示す医薬品として臨床応用されている。本講義では、これまで開発されてきたバイオ医薬の背景について解説するとともに、バイオ医薬として展開が大いに期待されている機能抗体をいかにデザインするか、それを実現するための計算科学の可能性について議論したい。

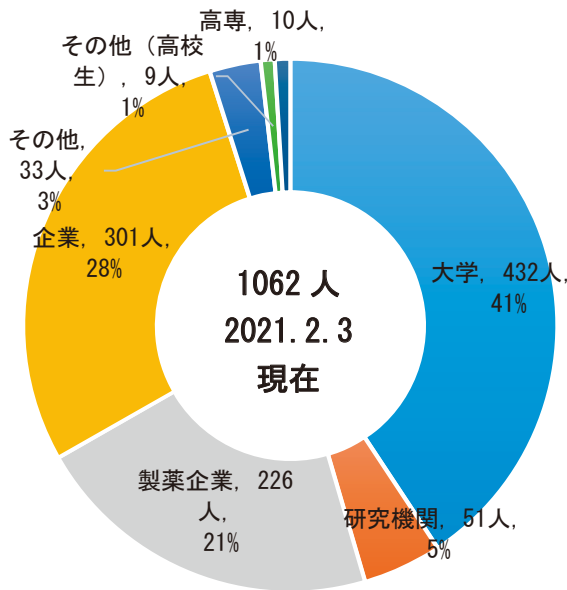
### 3.6 「AI の医療応用における規制・責任・品質論」 (担当：鎮西 清行)

機械学習の医療応用が始まっている。企業による製品開発への応用だけでなく、自身でディープラーニングを試してみたいドクターも多数いる。

この講義では、製品開発または研究開発そして臨床試用に際して知っておくべき規制や法的事項の概要と、関連する責任や品質について学ぶ。ソフトウェアの品質、連続的に変化する機械学習アルゴリズムと規制要求の関係、令和元年改正薬機法の新制度などにつき紹介する。

## 受講登録者状況等

2020年度は1,062人（最終）

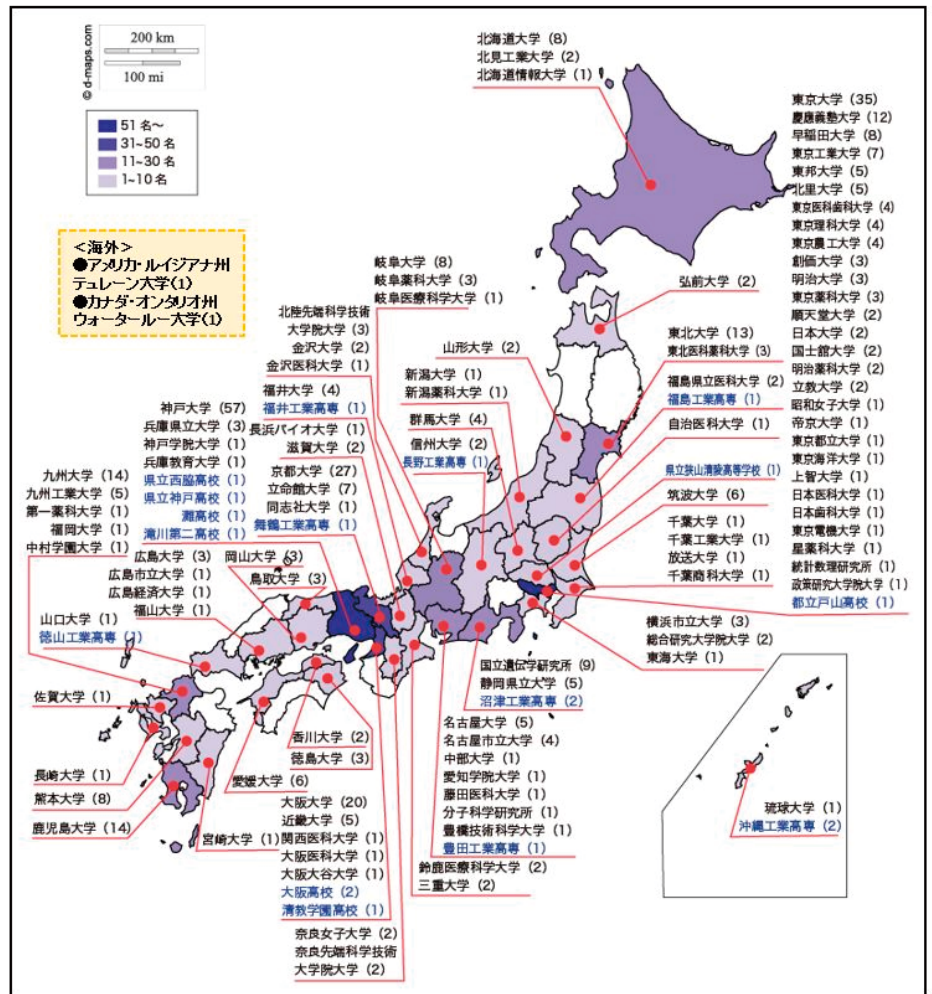


### 計算生命科学の基礎Ⅶ 申込登録者所属大学分布

- ・国内104大学 (38都道府県)
- ・海外2大学

合計432名

- ・高専10校、高等学校9校、19名



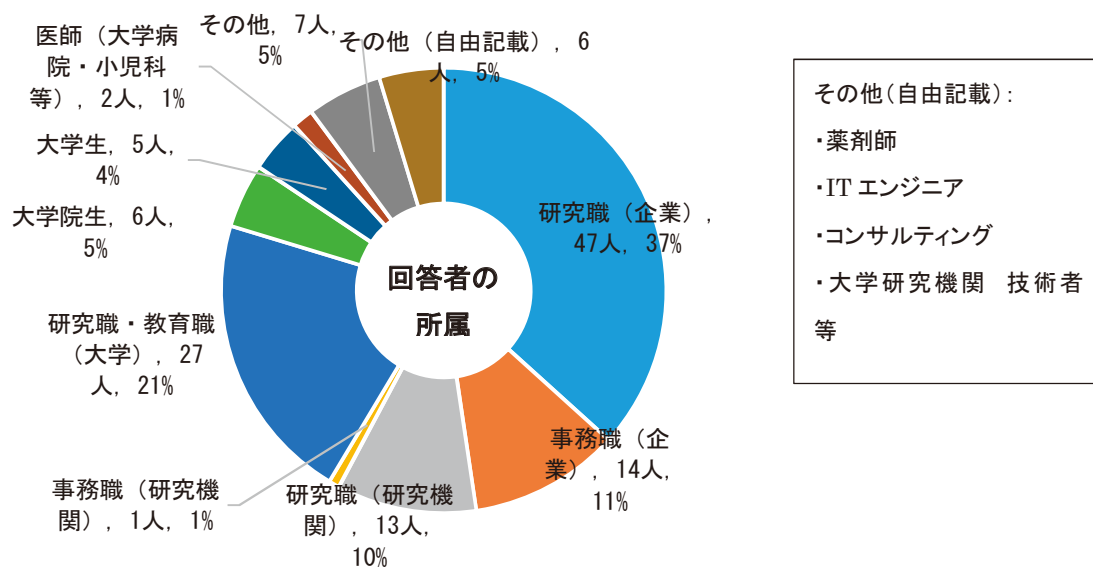
## 受講者アンケート（講義終了後）

### 【調査概要】

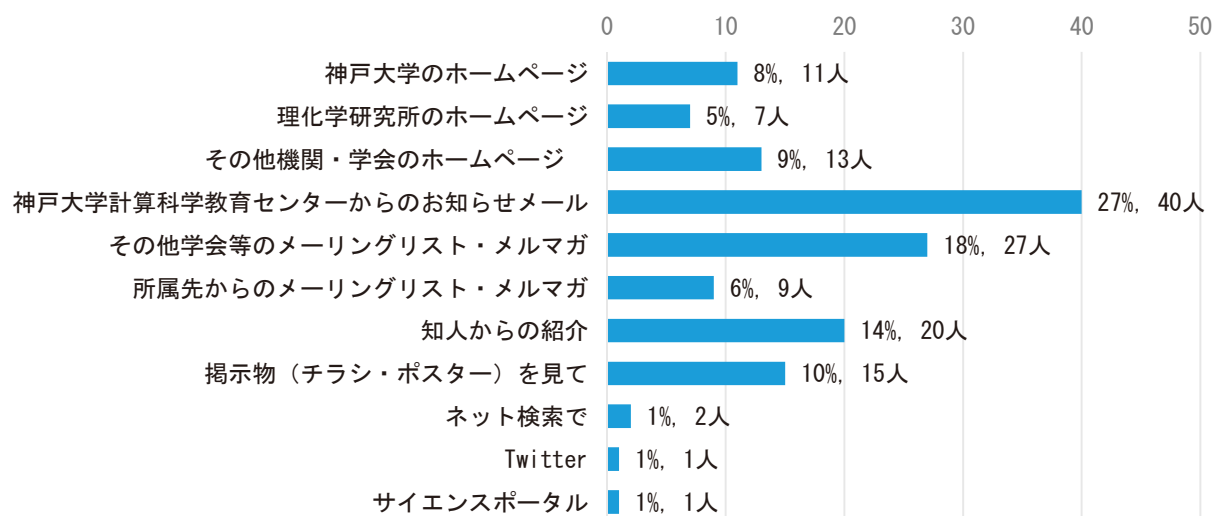
1. 対象 「計算生命科学の基礎 VII」の受講登録者
2. 標本数 1,062人（2021年2月3日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査機関 2021年2月9日（木）～2021年2月26日（金）
5. 回収数 128
6. 回収率 約12.0%

### 【アンケート結果】※アンケート結果の内容を一部抜粋

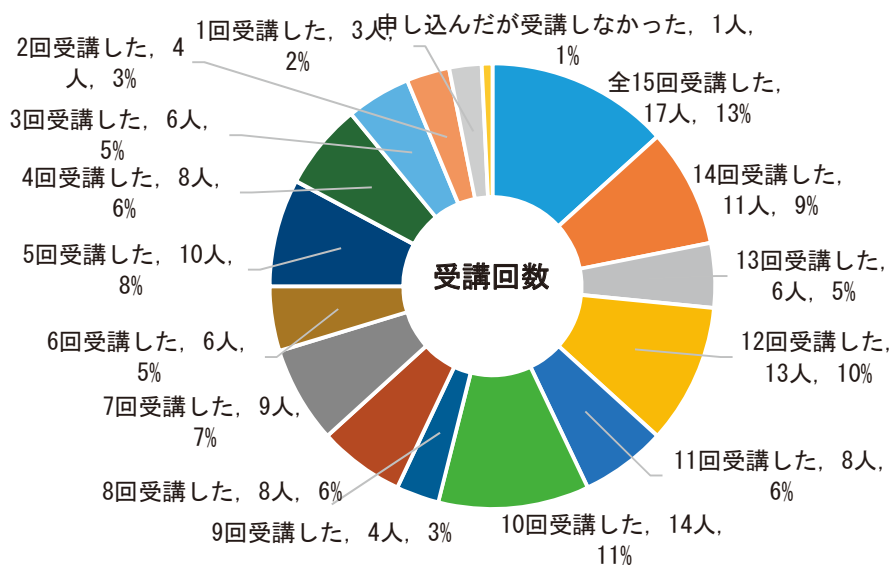
#### 1. 所属について



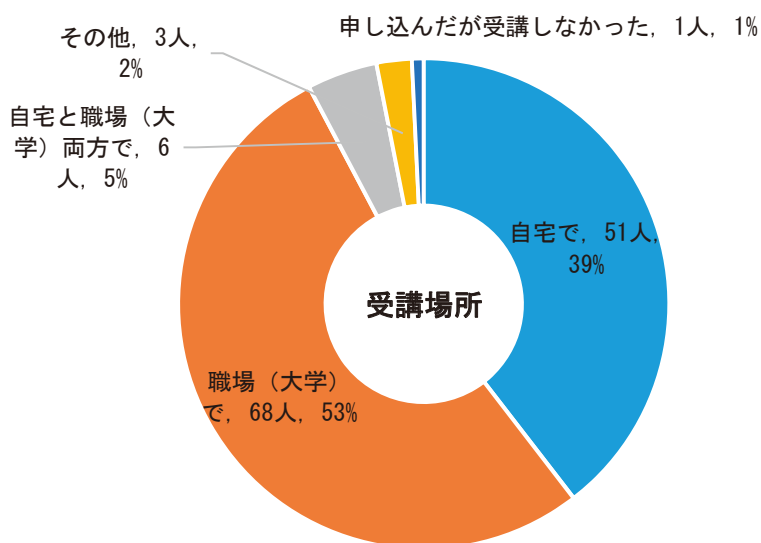
#### 2. 講義を知ったきっかけについて



### 3. 受講回数



### 4. 受講場所について



コロナ禍のため、自宅での受講者が昨年度の25%より大幅に上昇した。大学・職場での受講者は63%からやや下落した。

## 5. 講義全体の感想について

・今回初めて参加させていただきましたが、大変参考になりました。私など地方の人間は人伝で情報が入ってくることにあまり期待できないため、このようなオンラインで視聴できる教育セミナーは大変ありがたいです。

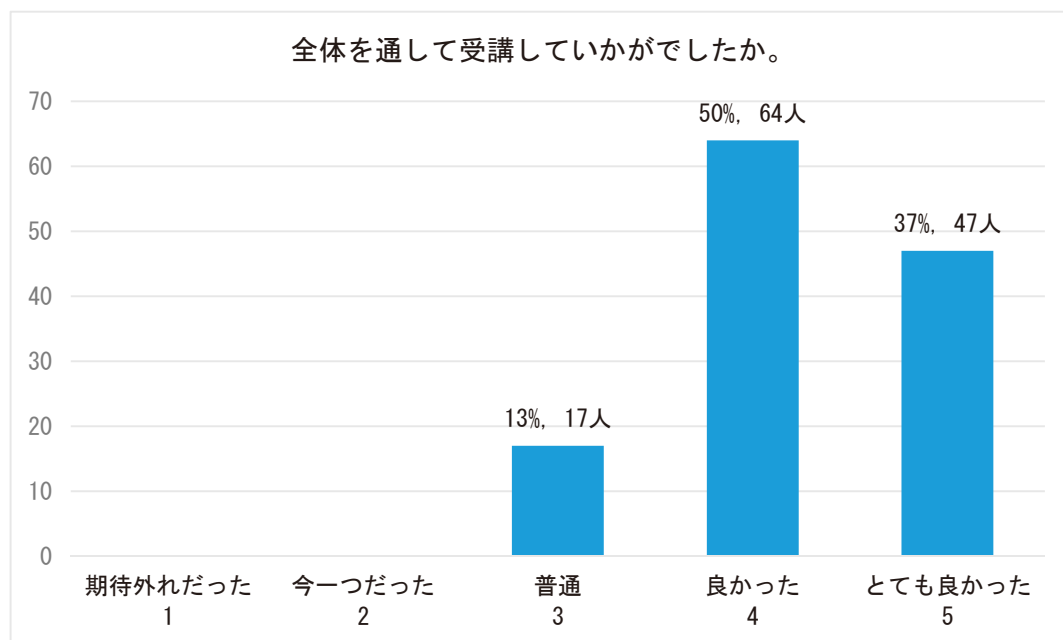
・業務のベースとなる基礎技術の理解に役立ったり、業務の改善のヒントとなる事象のとらえ方を得られたりした

・事前に資料を配ってもらえるのがありがたい。講師の方はたいへんだと思いますが、これからも続けて欲しいです。

・新型コロナウイルス対策を含め、ご多忙の中、このような遠隔講義を開講してくださり、誠にありがとうございます。機会があれば、2021年も受講する予定です。

・研究トレンドをフォローしようと思って参加してみたものの、専門的な話が多く、ついていけない部分がありました。しかし専門的なことが分からないなりにトレンドとしてどのような研究が行われているか知ることができ役立つ部分も多かったと思います。視聴タイトルに専門度のレベル（例えば、一般向け、大学生向け、院生向け、学会発表レベルなど）を示してもらえると、視聴を選択しやすいと思います

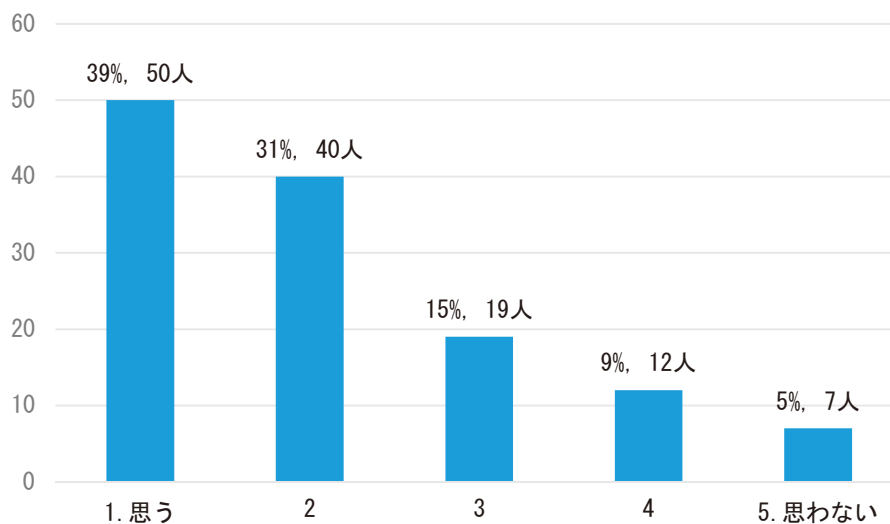
・各講義の内容を表面的には理解できるのですが、自分のパソコンで実装できるかというところまでできていません。自分の研究に活用したいと思うのですが、そうではないので自分の目的と内容がずれている気がしています。自分のパソコンに実装できるような内容の講義も追加していただけると有難いです。



### ※講師所属先からの直接配信について

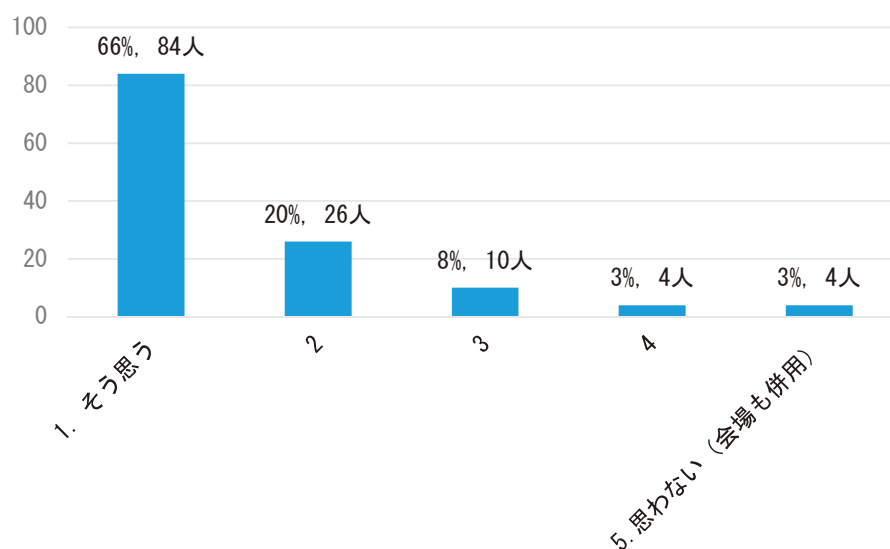
2020年度、初めて行われた講師所属先からの配信について、全15回終了後のアンケートで感想を伺った。

6. 講師によりばらつきがあったものの、全体として音声は良好だった。



そう思う（1. 2）の回答率が70%と全体としては概ね良好であった。

7. 所属先からの配信でも、大きな問題はなかったもので、コロナ収束後も所属先からの配信で構わないと思う。



そう思わない（5. 4）の回答率はわずか6%と、会場での対面開催を望む方は非常に少なかった。

## 8. 所属先からの配信についての感想

- ・出張がなくなって、時間の余裕ができたと感じています。講師の先生方もご多忙と思いますので、時間を有効活用して頂きたいと思います。オンラインで多少の音声トラブル等があるかもしれませんが、それ以上に講師にも受講生にもメリットがあると思います。
- ・最近のシンポなども発表される先生の所属先からの発信も多いので、特に違和感はありません。
- ・全く問題なく、逆にご研究所に訪問しているような感覚が良い
- ・東京で受講できたのでよかったが、音声の人により大小あり、聞き辛いことがあった。
- ・トラブルがあると集中が途切れるので、事前テストはしっかり行っていただきたい。
- ・たまに音声小さい先生がいらっしゃったりしましたが、概ね良好で殆ど問題無いと思います。移動時間が無い分お忙しい先生方のご都合が付きやすいのではないのでしょうか。
- ・現地会場にいない人間からするとまったく違いはなかった。
- ・他の受講者の質問内容が文章としても見えるようにした方がよいと思いました。
- ・所属先配信として国内の有能な先生方の講義を配信することの方が重要。
- ・当日スタッフの方のご苦労は大変だと存じますが、神戸にまで来て講義をするという物理的障壁がなくなるので、世界中の色々な場所から講義が出来るので、その分野で世界的に有名な先生から講義が受けられるというメリットがあるかと存じます。

## アーカイブ公開

公開許可のある講義のみ、共催の理化学研究所計算科学研究センターのホームページ eラーニングアーカイブ (<https://www.r-ccs.riken.jp/about/careers/e-learning/intro-com-life-sci/>) にて公開。

### 計算生命科学の基礎7 質量分析インフォマティクスの基礎

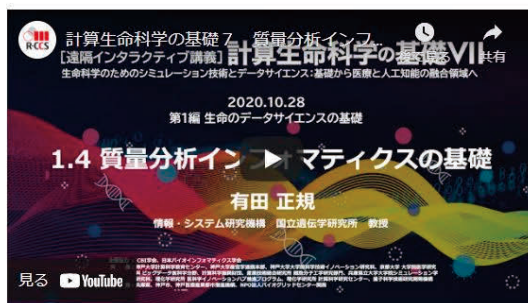
メタボローム解析、メタボロミクス、リポミクスと呼ばれる分野では、スペクトルの抽出、検索、代謝物の同定等において計算機をフル活用する。しかしゲノム解析に比較すると未整備な部分が多く、分野の概観が難しい。本講義では、質量分析の仕組み、化合物構造の表現方法、同定の基準など、基本的な情報解析の流れを解説する。NMRによる解析には触れず、タンデム質量分析計に基づいた解析を中心に紹介する。

計算生命科学の基礎7 〇

YouTubeリンク 質量分析インフォマティクスの基礎 (1) 〇

YouTubeリンク 質量分析インフォマティクスの基礎 (2) 〇

YouTubeリンク 質量分析インフォマティクスの基礎 (3) 〇



### 計算生命科学の基礎7 (2020)



2020年10月28日	レベル2	計算生命科学の基礎7 質量分析インフォマティクスの基礎
2020年11月11日	レベル2	計算生命科学の基礎7 新型コロナウイルス感染症治療薬探索を目指したシミュレーションと機械学習
2020年11月18日	レベル2	計算生命科学の基礎7 Analysis of antibody-antigen interactions from sequence data
2020年11月25日	レベル2	計算生命科学の基礎7 分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬支援
2020年12月2日	レベル2	計算生命科学の基礎7 分子シミュレーションと計測データの融合
2020年12月9日	レベル2	計算生命科学の基礎7 計算によって「何が説明できる」という信念が迫り来る未知のウイルスに出会ったとき
2021年2月3日	レベル2	計算生命科学の基礎7 AIの医療応用における規制・責任・品質論





神戸大学計算科学教育センター

[遠隔インタラクティブ講義]

生命科学のためのシミュレーション技術とデータサイエンス:  
基礎から医療と人工知能の融合領域へ

# 計算生命科学の基礎VII

2020 10.7 WED \ 2021 2.3 WED

毎週水曜日 [全15回] 17:00-18:30

神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信

対象: 大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者

[担当講師]

竹本 和広	九州工業大学 大学院情報工学研究院 生命化学情報工学研究系 准教授
中村 周吾	東洋大学 情報連携学部 教授
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
有田 正規	情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所 教授
渡辺 亮	京都大学 大学院医学研究科 特定准教授
関嶋 政和	東京工業大学 情報理工学院 准教授
Standley, Daron	大阪大学 微生物病研究所 教授
広川 貴次	産業技術総合研究所 上級主任研究員/筑波大学 教授
高田 彰二	京都大学 大学院理学研究科 教授
緒方 法親	株式会社日本バイオデータ 代表取締役/次世代バイオ医薬品製造技術研究組合 事業部 顧問(ゲノム技術)
上田 修功	理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長
荒牧 英治	奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授
森本 淳	理化学研究所 パトンゾーン推進研究プログラム ロボティクスプロジェクト 人間機械協調研究チーム チームリーダー
鎌田 春彦	医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬デザイン研究センター バイオ創薬プロジェクト プロジェクトリーダー
鎮西 清行	産業技術総合研究所 健康医工学研究部門 副研究部門長

企画協力: CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

生命科学は、計算科学(シミュレーション・統計学・構造科学・ディープラーニング・AIなど)が融合することにより、加速的に発展しつつあります。さらに、この知識の融合は「計算生命科学」として、創薬分野、農学や医学、健康関連分野に多様性をもたらし、アカデミア・産業界のイノベーションの推進力となっています。本講義では、バイオインフォマティクス、生命科学データベース、統計学およびシミュレーション科学そしてAIやディープラーニングの活用など多岐にわたる入門的な講義を配信してきました。7年目を迎える今年度は「生命科学のためのシミュレーション技術とデータサイエンス:基礎から医療と人工知能の融合領域へ」と題して、生命のデータサイエンスの基礎に始まり、分子シミュレーション、AIを医療分野に活用している最新事例を取り上げます。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、その現状と将来の展望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。

インターネット  
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「京コンピュータ前駅」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、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、産業技術総合研究所 細胞分子工学研究部門、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科、理化学研究所 医科学イノベーション推進プログラム、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、神戸医産産都市推進機構、NPO法人バイオグリッドセンター関西

▶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VII スケジュール

## 第1編 生命のデータサイエンスの基礎

### 10.7 代謝ネットワーク解析:基礎と応用

竹本 和広 (九州工業大学 大学院情報工学研究科 生命化学情報工学研究系 准教授)

代謝は一連の生化学反応の総称であり、学術的側面はもちろんのこと医学・農学・環境学などの応用的側面においても興味深い。特に、代謝はしばしばネットワークの視点から解析される。ここでは、そのような代謝ネットワーク解析について紹介する。基礎から始め近年の動向についても紹介する。特に、進化解析、メタボローム相関ネットワーク解析、標的化合物合成経路の列挙・探索、未知反応経路予測、Reverse Ecologyなどについて触れる。

### 10.14 機械学習・深層学習と生命科学

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、ゲノム塩基配列やアミノ酸配列に機械学習・深層学習の方法を適用するインフォマティクス解析、分子構造を対象としたシミュレーション解析などが行われてきた。本講義では、社会全体に急速に応用が広がっている機械学習・深層学習の方法の原理と、それがタンパク質のAMIN酸・立体構造の解析にどのように応用されているのかを、実例を交えて紹介する。

### 10.21 タンパク質構造インフォマティクス基礎

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)

タンパク質の配列・立体構造データの蓄積に伴い、データ駆動型アプローチの重要性がますます高まってきている。本講義では、タンパク質立体構造の全体的および局所的比較を軸に、構造インフォマティクス技術の基礎と役割を紹介する。また応用例として、産総研人工知能研究センターで開発しているデータベースなどを紹介する。

### 10.28 質量分析インフォマティクスの基礎

有田 正規 (情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所 教授)

メタボローム解析、メタボロミクス、リピドミクスと呼ばれる分野では、スペクトルの抽出、検索、代謝物の同定等において計算機をフル活用する。しかしゲノム解析に比較すると未整備な部分が多く、分野の概観が難しい。本講義では、質量分析の仕組み、化合物構造の表現方法、同定の基準など、基本的な情報解析の流れを解説する。NMRによる解析には触れず、タンデム質量分析計に基づいた解析を中心に紹介する。

### 11.4 細胞レベルでの解体新書「シングルセルゲノミクス」

渡辺 亮 (京都大学 大学院医学研究科 特定准教授)

シングルセルゲノミクスは、従来の組織学的な細胞分類では見えなかった新規の細胞種の同定を可能にし、ヒトの初期発生など入手困難なサンプルにおける細胞状態の変化を明らかにしている。複数の細胞状態への変化を検出することで分化の分岐点を決定し、我々の体をつくりだす細胞運命決定機構の分子メカニズムに迫ることができる。さらに、シングルセルレベルでのTCR/BCRの配列決定法が従来のレパトア法によって変わろうとしている。本講義ではシングルセル解析の現状を紹介する。



➤ **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 真里 (医薬基盤・健康・栄養研究所 バ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 量子生命科学領域 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科学研究科 教授)、八幡 恵明 (量子科学技術研究開発機構 量子生命科学領域 量子生命情報科学グループ グループリーダー)、森 一郎 (神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 特命教授)、森 義治 (神戸大学大学院システム情報科学研究科 講師)

## 第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

### 11.11 新型コロナウイルス感染症治療薬探索を目指したシミュレーションと機械学習

関崎 政和 (東京工業大学 情報理工学 准教授)

現在、新型コロナウイルス感染症は、世界的に大きな問題になってきている。小康状態に仮に落ち着いたとしても、第二波や、SARS-CoV-3のような更に新しいコロナウイルスが広がる可能性も考えられる。COVID-19のような感染症には、長い時間をかけた準備ができなため、リポジショニングのような、既に知られている薬剤の転用が重要であるが、我々は、このような時代にどのようなシミュレーション手法と機械学習手法が貢献可能かを事例と共に考えてみたい。

### 11.18 Analysis of antibody-antigen interactions from sequence data

Standley, Daron (大阪大学 微生物病研究所 教授)

Antibodies are the soluble portion of B cell receptors (BCRs). Since antibodies are a critical part of our immune system's defense against disease, there is growing interest in identifying BCR sequences associated with specific disease-related antigens. In the recent COVID-19 pandemic, for example, a number of groups reported antibody sequences against the SARS-CoV-2 spike protein within months of the outbreak (Brouwer, et al., 2020; Cao, et al., 2020; Chi, et al., 2020). Structure determination of antibody-antigen complexes is a low throughput task, so there is a need for computational methods that can characterize the epitopes of disease-specific antibodies from sequence information alone.

### 11.25 分子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 上級主任研究員/筑波大学 教授)

クライオ電顕をはじめとするタンパク質立体構造解析技術の発展により、構造データを起点とした創薬支援研究が再び注目されてきている。しかし、構造データの中には、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、構造データと創薬を橋渡す高度なインシリコ創薬支援技術について基礎と応用例について紹介する。

### 12.2 分子シミュレーションと計測データの融合

高田 彰二 (京都大学 大学院理学研究科 教授)

今日、分子シミュレーションはタンパク質等の分子動態研究・創薬研究の一方法として普及している。しかし、シミュレーションが実験によって代わるわけではない。むしろ実験データと融合することで分子シミュレーションは更に役に立つ。その一般的な枠組みは、ベイズ統計学に基づいたモデル構築(ベイズモデリング)、機械学習のひとつ)によって与えられる。講義では、その枠組みを概説し、具体例を紹介する。

## 第3編 医療と人工知能の融合領域

### 12.9 計算によって「何かが説明できる」という信念が迫り来る未知のウイルスに出会ったとき

緒方 法親 (株式会社日本バイodata 代表取締役/次世代バイオ医薬品製造技術研究組合 事業部 顧問(ゲノム技術))

計算は古来より生命科学に貢献してきた。アリストテレスは家畜乳の成分比較に計算を用いたし、統計学・検定はフィッシャーが農場で開発したものである。それでも計算生命科学に新鮮味があるのは、測定装置の飛躍的な性能向上によって生命科学における計算の重要性が増したからだろう。データがシェアされる今日では、居間で計算することによって動物研究の再現性を植物で調べ、新興ウイルスの性質を調べることができる。講義では事例と共に計算生命科学発展のカギを探る。

### 12.16 AI医療の最新活用事例

上田 修功 (理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長)

近年、AI(機械学習)技術は、工学のみならず、自然科学、社会科学分野においても多用され、AI技術への関心が高まっている。本講義では、AI技術の医療応用に関し、我々が取り組んでいる最新の活用事例である、前立腺癌の術後の再発予測手法、および、創薬ターゲット探索のための患者層別化手法について紹介する。具体的には、両者で用いているAI技術の詳細を各々説明し、その有用性を紹介する。

### 1.13 自然言語処理が拓く医療AIの未来

荒牧 英治 (奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授)

今、医療現場が変わりつつある。電子カルテに集積される医療ビッグデータ、それを用いた人工知能による診断支援、さらには、スマートフォンやスマートスピーカといった新たなデバイスからの患者情報など、様々な材料、技術が登場している。しかし、生成される多様なデータの相当な部分は自然言語文であり、今後もそれはただに変わりそうにない。つまり、医療データの利活用には、この自然言語文を扱う技術が必須となる。講義では、カルテビッグデータを用いた診断支援、つづきを用いた感染症流行推定、スマートデバイスで患者の声を集める試みなど、進行中の研究テーマの概要を具体的にご説明し、議論したい。

### 1.20 運動意図推定とロボットリハビリテーション

森本 淳 (理化学研究所 バトンゾーン研究推進プログラム ロボティクスプロジェクト 人間機械協調研究チーム チームリーダー)

少子高齢化の社会的背景から、日本をはじめとした先進諸国においてロボティクス技術を用いた運動アシストシステムの開発が盛んとなっている。ここでは、外骨格ロボットをはじめとした運動アシスト技術のこれまでの発展を概説するとともに、私たちの研究グループにおける、運動意図推定手法をはじめとした研究開発やリハビリテーション応用の活動について紹介する。

### 1.27 抗体医薬の分子デザインに叶う計算生命科学の可能性

鎌田 春彦 (医薬基盤・健康・栄養研究所 創薬デザイン研究センター バイオ創薬プロジェクト プロジェクトリーダー)

現在、中和活性や細胞傷害活性などの、様々な機能を持つ抗体が画期的な効果を示す医薬品として臨床応用されている。本講義では、これまで開発されてきたバイオ医薬の背景について解説するとともに、バイオ医薬として展開が大いに期待されている機能抗体をいかにデザインするか、それを実現するための計算科学の可能性について議論したい。

### 2.3 AIの医療応用における規制・責任・品質論

鏡石 清行 (産業技術総合研究所 健康医学研究部門 副研究部門長)

機械学習の医療応用が始まっている。企業による製品開発への応用だけでなく、自身でディープラーニングを試してみたいドクターも多数いる。この講義では、製品開発または研究開発そして臨床試用に際して知っておくべき規制や法的事項の概要と、関連する責任や品質について学ぶ。ソフトウェアの品質、連続的に変化する機械学習アルゴリズムと規制要求の関係、令和元年改正薬機法の新制度などにつき紹介する。

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\\_science/7/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science/7/)

受講方法  
講義は神戸大学計算科学教育センターで行ない、インターネットを通じて中継する会議システムWebexを使用して配信します。直接受講に加えて、どこからでもオンライン受講が可能です。

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](mailto:ls-contact@eccse.kobe-u.ac.jp)



## コーディネーターコメント

---

### 第1編

生命科学研究を前進させるために、統計解析・シミュレーション・機械学習などを統合したデータサイエンスの必要性が、これまでになく高くなっていることは多くの方が感じていらっしゃると思います。喫緊の課題として、これらは昨今の新型コロナパンデミックの克服のためにも重要です。ところが生命科学で生み出されるデータは、ゲノムなど生体分子から疾患などの表現型に至る非常にバラエティーに富んだもので、それらのデータを扱う手法も多岐に渡ります。このために、そもそも「生命科学のためのデータサイエンスをどのように教育すれば良いか？」という難問が存在します。この問題を根本的に解決した大学はありませんが、この遠隔講義(毎年更新される最新の内容をネットを通じて広く希望者に届ける)が一つの回答になると考えています。もちろん多岐にわたる基礎的な分野を満遍なくカバーすることは大変難しいのですが、受講者を始めとした皆さんのご意見を参考に「最適化」して行きたいと思いますので、ご支援頂ければ幸いです。



白井 剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)

様々な実験方法や計測技術が開発され、今や1細胞レベルで細胞の詳細な状態がわかるようになってきました。計測された膨大なデータを、思考の道具であるコンピュータを用いていかに料理し生命現象を解き明かすか、これが大きな課題となっています。このように、生命科学において情報科学の比重はますます大きなものになってきています。本講義では、基礎から応用まで様々なアプローチが紹介されています。これらの講義が、みなさんの知的好奇心を刺激し、何かしら今後の学習や研究の足がかりなることができれば、コーディネーター冥利に尽きます。



河野 秀俊 (量子科学技術研究開発機構 量子生命科学領域 グループ  
リーダー)

## 第2編

思いもよらぬコロナ禍で講演やセミナーのオンライン化が急速に進み、この遠隔講義「計算生命科学の基礎」もその中の単なる一つになってしまいましたが、2021年度で8年目の開催となりました。以前ここに書いたコメントで、このセミナーを通して「計算生命科学とは何か」が明らかになっていけばいい、といったことを述べましたが、今回のCOVID-19の試練に対して「我々が何をできたか」が、この問いに対する回答のヒントになっているように思います。医学・創薬の立場から次々に明らかにされる知見・情報を基に、シミュレーションやバイオインフォマティクス、データサイエンスの「ドライ系」研究者たちも日々様々な努力を重ね、人類を救うための科学・技術を創成しています。一連の講義で、そういった一端もお伝えできれば幸いです。



田中 成典（神戸大学大学院システム情報学研究科 教授）

生命を理解する手段として計算機を用いた方法が広範に用いられるようになってきました。このことは本遠隔講義でカバーされている広大な分野をご覧くださいと理解することができます。新型コロナウイルス感染症は未だその収束には至っていませんが、2020年度はそのような状況下にもかかわらず講師の先生方には魅力的な講義をご提供いただけました。講義内容としましてもコロナについての最新の研究紹介もございました。その内容を見てもみると、最新研究の方法論や技術は着実な基礎研究の発展に基づいていることが分かります。未知の現象が生じたときに応用研究が迅速に遂行できるのはその背後に堅実な基礎があるからに他なりません。本講義をそのような基礎を学ぶための場としてお役に立てただけであれば幸いです。



森 義治（神戸大学大学院システム情報学研究科 講師）

### 第3編

今年度は伊藤眞里先生と2人3脚で、新しい講師陣をお迎えして応用編（第3編）を企画・担当させて頂くことが出来ました。2020年春から継続している新型コロナウイルス感染症への対策にも、計算生命科学が大きく貢献できる分野です。この応用編では、研究に携わる大学院生・若手研究者の方々にも計算生命科学の応用研究への興味を持って頂けるよう、新型コロナウイルス感染症関連のトピックも織り交ぜて、様々な分野・産業への応用について工夫を凝らしながらわかりやすく講義をして頂いた講師の方々に感謝しております。受講者の皆さんからのアンケート結果を参考に、今後も受講される方々に興味を持って頂けるような多彩な内容の応用編を企画できればと思います。



森 一郎（神戸大学大学院 科学技術イノベーション研究科 特命教授）

森一郎先生に声をかけていただき、「計算生命科学の基礎」の応用編（第3編）の担当をさせて頂いています。今年度は、COVID-19 関連研究の取り組みを織り交ぜながら、6名の講師の先生にAIの創薬・医療への応用、社会実装に向けた課題などをわかりやすく講義いただきました。受講者の皆様からの活発な質疑応答をいただきながら、関心の高さを実感することができました。今後もできるだけ多くの方々に関心を持って受講頂けるように、そして、AI技術とデータサイエンス、計算科学の融合領域の橋渡しができるように、受講者の皆様の講義アンケート中のご提案も活用させて頂きながら、様々な分野の先生方に応用編の講義をお願い出来ればと思います。



伊藤 眞里（医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト 上席研究員）





## 神戸大学計算科学教育センター

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-48

TEL: 078-599-6720

<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp>



2021 年 3 月