



# 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



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
2017 年度「計算生命科学の基礎Ⅳ」	3
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」	14
大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会 (AXIES2017)	17
2018 年度「計算生命科学の基礎Ⅴ」	23
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」	34
大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会 (AXIES2018)	38
コーディネーターコメント	43



## 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 5 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き、生命科学に興味を持つ若手研究者の育成とともに当該分野の裾野を、産業界を含めて広げることを目的とした連続講座です。本講義の登録者数は、大学や研究所および企業の方々を含め 700 名を超え、また WebEx を用いた遠隔インタラクティブ講義には毎回の 200 名近くの方がリアルタイムにオンライン上で受講していただいています。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-CGS)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、後日講義を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、2017, 2018 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 年度の 3 年間の開催報告書も 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。

平成 31 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

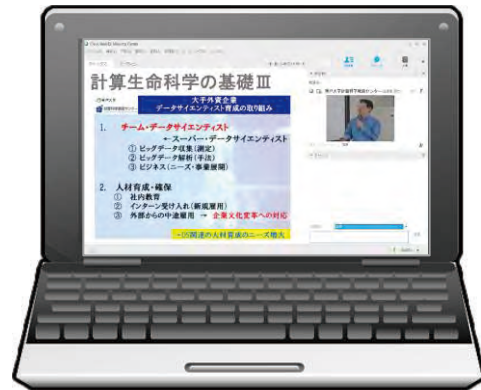
遠隔インタラクティブ講義は、WEB 会議システム（WebEx）を利用し、会場（神戸）から各地の受講者にリアルタイムに配信する講義です。受講者はインターネット接続環境があれば、各自のパソコンやモバイル端末等でどこからでも無料で視聴ができ、講師への質問等もチャット機能でやりとりができます。

### 【講義日前日】

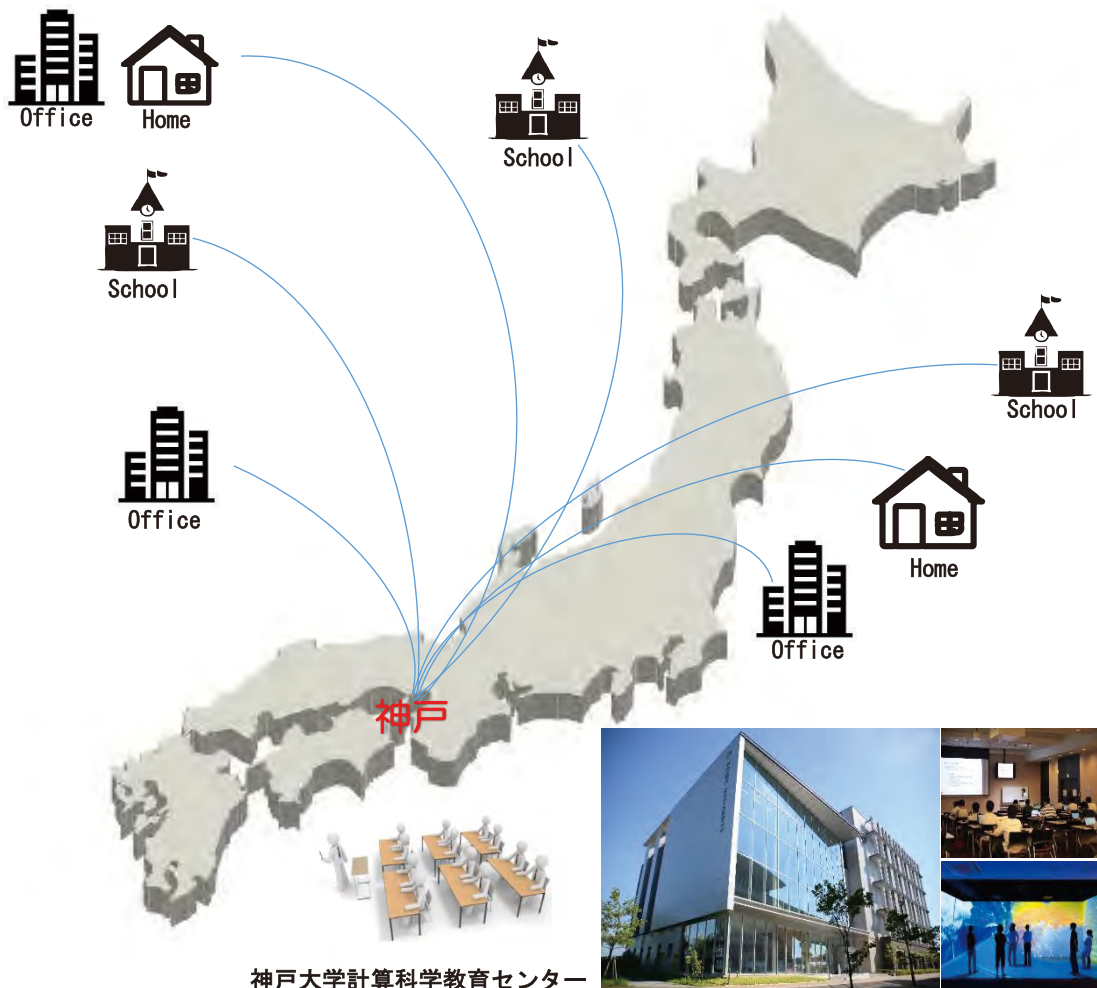
アクセス用 URL の記載された招待メールを全受講者に一斉送信します。

### 【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



2017年度  
計算生命科学の基礎Ⅳ





## 目的

生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げています。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野に大きな影響を及ぼし、知識の融合を促し研究分野のパラダイムシフトを現実のものにしています。その原動力となっているものの一つがコンピュータを活用する計算生命科学です。計算生命科学はDNAに刻み込まれたゲノム情報、タンパク質の構造情報、ヒトレベルでの健康・疾患情報などを含むビッグデータを解析・システム統合し、シミュレーションでの予測によって生命を理解し、医療分野への応用の基盤となる学際領域です。今後、データサイエンスやAI技術などの新たな科学領域や技術と組み合わせて、次世代技術・知識が創生される舞台となります。この遠隔講義は、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お持ちの様々な方々に、その基礎と今後の展望を学んでいただき、様々な分野で基礎から応用までの研究開発を支える人材の育成を目指しています。

## 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 生命システム研究センター  
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 計算科学研究機構、計算科学振興財団

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

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

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）

鶴田 宏樹（神戸大学学術・産業イノベーション創造本部／工学研究科 准教授）

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 研究支援推進員）

### ▼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）  
石野 麻由子（神戸大学計算科学教育センター）  
井上 隆昭（神戸大学計算科学教育センター）  
八木 学（理化学研究所 計算科学研究機構）  
土井 陽子（理化学研究所 生命システム研究センター）

## 開催日程

---

2017年10月4日～2018年1月24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

---

- ・ 鶴田 宏樹（神戸大学学術・産業イノベーション創造本部／工学研究科 准教授）
- ・ 岡田 随象（大阪大学大学院 医学系研究科 遺伝統計学 教授）
- ・ 白井 剛（長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授）
- ・ 川端 猛（大阪大学蛋白質研究所 寄附研究部門 准教授）
- ・ 瀬々 潤（産業技術総合研究所 人口知能研究センター機械学習研究チーム チーム長）
- ・ 平野 敏行（東京大学 生産技術研究所 助教）
- ・ 福澤 薫（星薬科大学 薬学部 准教授）
- ・ 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）
- ・ 池口 満徳（横浜市立大学大学院 生命医科学研究科 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）
- ・ 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）
- ・ 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 兼 滋賀大学データサイエンス学部 准教授）
- ・ 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）
- ・ 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）
- ・ 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）

<p><b>はじめに～計算生命科学の概要（担当：鶴田 宏樹）</b></p> <p>生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げている。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野へと大きな影響を及ぼしている。その原動力となっているものの一つがコンピュータを活用する計算生命科学である。本講義では、計算生命科学を取り巻く環境と将来について理解を促しつつ、講義全体の導入紹介を行う。</p>
<p><b>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</b></p> <p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>岡田 随象（企画）「ゲノムデータをどう扱えば、医学と医療は変わるのか～」羊土社（実験医学 2016年10月号）</li> <li>日本バイオインフォマティクス学会（編集）「バイオインフォマティクス入門」慶應義塾大学出版会（2015）</li> <li>藤 博幸「タンパク質の立体構造入門—基礎から構造バイオインフォマティクスへ」講談社（2010）</li> <li>岩崎 憲治. 2016. 新時代：クライオ電子顕微鏡による近原子分解能での解析. 領域融合レビュー, 5, e010 (2016) DOI: 10.7875/leading.author.5.e010</li> <li>上野 豊, 他.「解説 電子顕微鏡によるタンパク質立体構造の単粒子解析」日本物理学会誌 57(8) 568-574. (2002)</li> <li>Joachim Frank. 2006. Three-Dimensional Electron Microscopy Of Macromolecular Assemblies. Oxford University Press.</li> <li>瀬々潤、浜田道昭「生命情報処理における機械学習 多重検定と推定量設計（機械学習プロフェッショナルシリーズ）」講談社（2015）</li> </ol>
<p><b>1.1 「遺伝統計学の基礎と応用」（担当：岡田 随象）</b></p> <p>遺伝統計学（statistical genetics）は、遺伝情報と形質情報の関わりを統計学の観点から研究する学問分野であり、一次的に処理されたゲノム情報を適切に解釈し、社会還元するためのデータ解析学問として注目されている。大規模ヒト疾患ゲノム解析により同定された数多くの疾患感受性遺伝子の情報を、多彩な生物学・医学データベースと分野横断的に統合することにより、新たな疾患病態の解明や、疾患バイオマーカーの同定、新規ゲノム創薬、疾患疫学の謎の解明、等に貢献できると期待されている。</p>
<p><b>1.2 「ゲノミクスからの構造インフォマティクス」（担当：白井 剛）</b></p> <p>大規模ヒト疾患ゲノム解析により疾患関連変異の探索は極めて効率化されたが、通常その情報を疾患メカニズムから創薬などの応用へ繋げるためには、分子構造の解析が必要になる。このとき、ゲノム情報量と分子構造情報量のギャップが問題となるが、構造インフォマティクスはこのギャップを埋めるための手段である。この講義では、なるべく具体例を示しながら超分子モデリング、相互作用予測、疾患変異マッピング解析などの手法について解説する。</p>
<p><b>1.3 「電子顕微鏡解析」（担当：川端 猛）</b></p> <p>近年、低温電子顕微鏡の単粒子解析による3次元分子構造の解析技術が大きく進展し、X線結晶解析・NMRに並ぶ第三の構造解析技術として定着しつつある。この進歩は、電子直接検出器などのハードウエ</p>

アの刷新とともに、EMAN2、Relion など優れた画像処理プログラムの開発によるものが大きい。本講義では、単粒子解析の情報処理の各技術（2D 画像分類、3D 画像再構成、原子モデリング）を順に説明し、大量の 2D 画像データ群から高解像度の 3D 画像と原子モデルを推定するための計算法を概説する。

#### 1.4 「機械学習・人工知能技術入門」（担当：瀬々 潤）

生命科学から算出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、農学へと繋げていく期待は高い。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、いわゆる人工知能の導入を行う。その上で、計算生命科学への応用に関する現状と議論を行う。

### 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. 柏木浩（著・監修）「タンパク質密度汎関数法」森北出版（2008）
2. 佐藤文俊，中野達也，望月祐志，「プログラムで実践する 生体分子量子化学計算 - ProteinDF/ABINIT-MP の基礎と応用」 森北出版（2008）
3. 福澤 薫 「量子論に基づくタンパク質—化学物質相互作用解析～FMO 創薬の実現に向けた取り組み」日本薬理学雑誌 149, 240-246（2017）
4. 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）.
5. 神谷成敏、肥後順一、福西快文、中村春木著「タンパク質計算科学（基礎と創薬への応用）」共立出版（2009）

#### 2.1 「計算生命科学のための量子化学基礎」（担当：平野 敏行）

量子化学シミュレーションは、実験化学と相補的に用いることで物性・化学反応の解明に威力を発揮する、強力な研究手法である。コンピュータの性能向上と計算手法の進歩により、これまで難しいと考えられてきた大規模生体分子の量子化学シミュレーションが実用的になりつつある。量子化学シミュレーションの理解を助ける量子化学計算理論・計算法や分子生物学の基礎から、最新のタンパク質カノニカル量子化学計算について紹介する。

#### 2.2 「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」（担当：福澤 薫）

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のが期待されている。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。

#### 2.3 「QM/MM 法を用いたタンパク質の機能解析」（担当：鷹野 優）

タンパク質は巨大かつヘテロな系であり、機能を有効に発揮できるように、その「かたち」を変化させる。タンパク質機能の理解・予測に、機能発現に関わる局所部分（活性中心）には量子力学(QM)を、活

性中心を取り囲むタンパク質の「かたち」の変化には古典力学(MM)を適用した QM/MM 法は極めて有効である。本講義では QM/MM 法の理論背景からはじめ、タンパク質の機能解明への応用について紹介する。

#### 2.4 「生命系の分子動力学シミュレーション」(担当:池口 満徳)

生体分子モーターなど、多くの生体分子は動くことで機能している。そのような生体分子の動きについて、コンピュータによって研究する方法が分子動力学シミュレーションである。本講義では、分子動力学シミュレーションの基礎から、タンパク質や核酸などの生体分子に適用した事例まで解説する。

#### 2.5 「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」(担当:広川 貴次)

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。

### 第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用

[参考図書]

1. 本村陽一, 岩崎弘利著「ベイジアンネットワーク技術」東京電機大学出版局(2006)
2. 鈴木 譲, 植野 真臣編著, 黒木 学, 清水 昌平, 湊 真一, 石畠 正和, 樺島 祥介, 田中 和之, 本村 陽一, 玉田 嘉紀著「確率的グラフィカルモデル」共立出版(2016)
3. 本村陽一 編著(著), 竹中 毅 編著(著), 石垣 司 編著(著)「サービス工学の技術 —ビッグデータの活用と実践」東京電機大学出版局(2012)
4. 産業技術総合研究所著「社会の中で社会のためのサービス工学～モノ・コト・ヒト づくりのための研究最前線～」カナリア書房(2014)
5. 水口賢司「創薬の初期研究におけるデータベース構築とモデリング」学術の動向, 2017 Jul 1, 22(7):62-65
6. 夏目やよい, 水口賢司「計算システム生物学による創薬:分子、構造からネットワークへ」日本薬理学雑誌 Vol. 149 (2017) No. 2 p. 91-95  
[https://www.jstage.jst.go.jp/article/fpj/149/2/149\\_91/\\_article/-char/ja/](https://www.jstage.jst.go.jp/article/fpj/149/2/149_91/_article/-char/ja/)

#### 3.1 「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～」(担当:本村 陽一)

ビッグデータを活用する人工知能技術に大きな期待が寄せられている。実社会で生成される各種のビッグデータを活用する人工知能技術として機械学習の発展が近年 爆発的な性能向上をもたらした。本講義では機械学習分野に概観と、その中で不確 実な現象のモデル化に用いられる確率モデリング技術の基礎と応用について解説する。

#### 3.2 「ヒトを対象とした医学研究のデザインと解析手法」(担当:田中 佐智子)

ヒトの健康・疾病に関連するリスク要因を探求する場合、ヒトを対象とした医学研究の実施が必要となる。本講義では、健康人 10 万人を追跡した大規模研究において、遺伝子・バイオマーカーなどのリスク

要因を評価するための研究デザインと解析手法を紹介する。また、患者を対象とした医学研究のデザインと解析手法についてもふれ、高次脳神経機能やバイオマーカーの評価の実例を紹介する。

### 3.3 「計算システム生物学と創薬」(担当:水口 賢司)

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。

### 3.4 「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」(担当:本間 光貴)

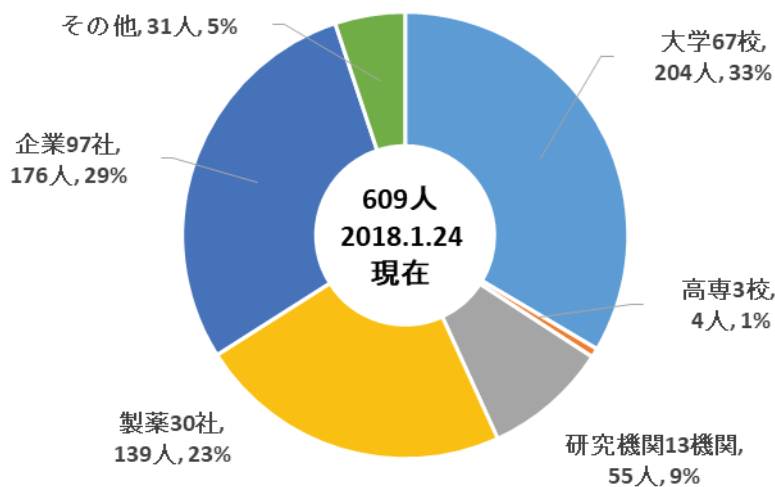
近年の創薬において、タンパク質-リガンド間のドッキングによるインシリコスクリーニングはなくてはならないものとなっている。また、現場の創薬ではヒットが得られた後の活性や ADMET プロファイルの向上を目指した設計も重要である。本講義では、インシリコスクリーニングの精度を向上させるためのポイントについて説明するとともに、ヒットが得られた後の設計手法について AMED の創薬インフォマティクスシステム構築で開発中の心毒性予測モデル等を含めて紹介する。

### 3.5 「Real World Data: 統計か疫学かコンピュータサイエンスか」(担当:田崎 武信)

統計学を愛するがゆえにデータマイニングを学び、統計学を愛するがゆえに機械学習を学び、そしていまは、統計学を愛するがゆえに疫学を学んでいる。いまの疫学は昔とくらべ格段にてごわく、社会科学分野の「実証分析」にも応用されている。ずいぶん(数十年)前になるが、神戸大学の計測工学/システム工学で統計学を非常勤で14年間教えた。そこでは学生から多くのことを学んだ。その経験を踏まえ、医療データの解析で存在感を持ち続けている統計学を紹介したい。

## 受講登録者状況等

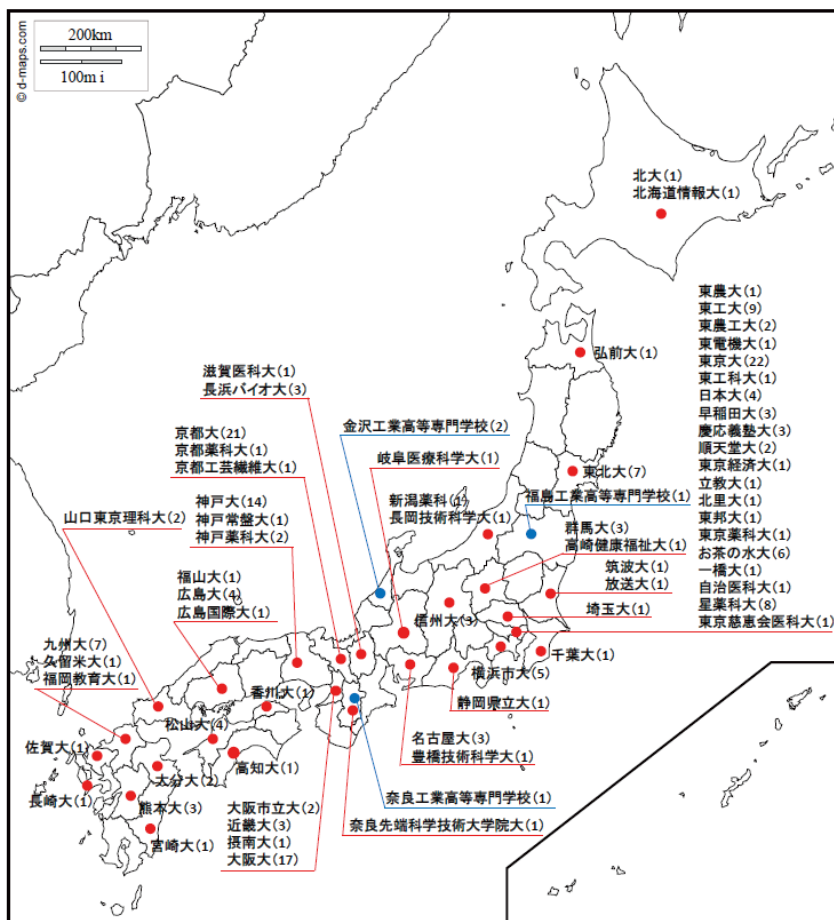
2017年度は609人（最終）



### 計算生命科学の基礎Ⅳ 申込登録者所属大学分布

2018/1/24現在

- ・国内66大学、高専3校  
(32都道府県)
  - ・海外1大学
- 合計208名



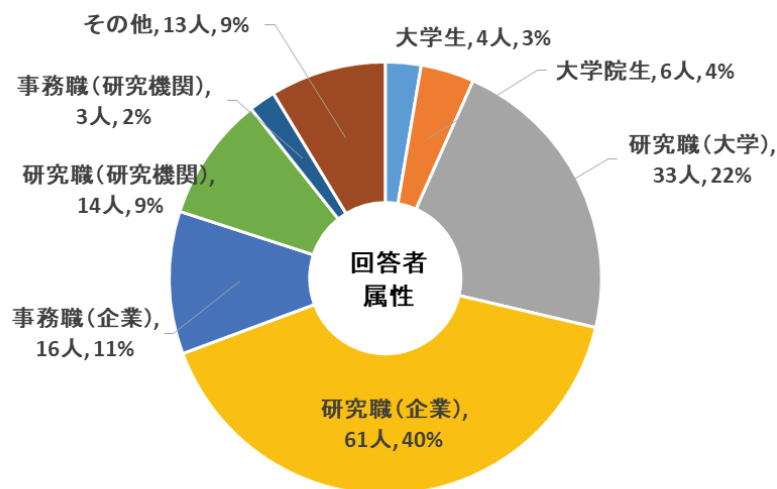
## 受講者アンケート（講義終了後）

### 【調査概要】

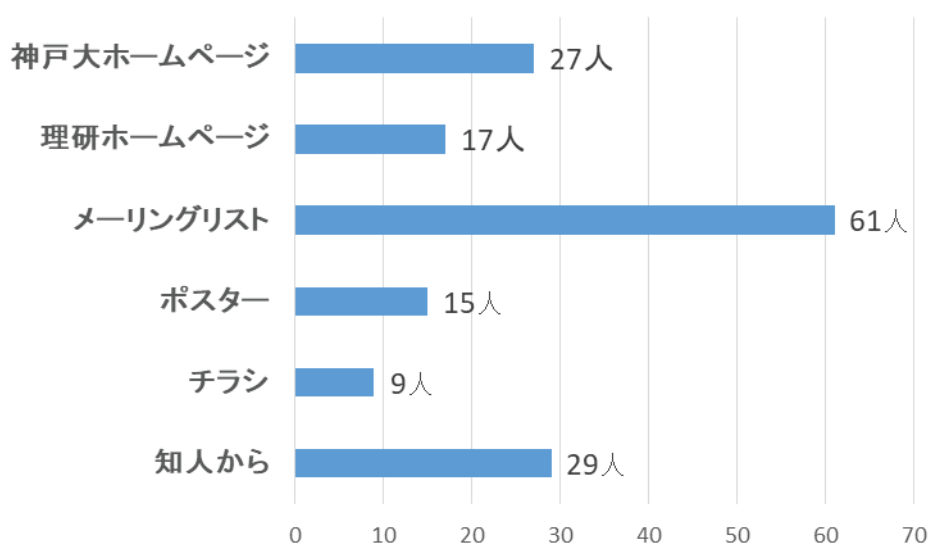
1. 対象 「計算生命科学の基礎Ⅳ」の受講登録者
2. 標本数 609人（2018年1月24日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査期間 2018年1月25日（木）～2018年2月9日（金）
5. 回収数 150
6. 回収率 約24.6%

### 【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

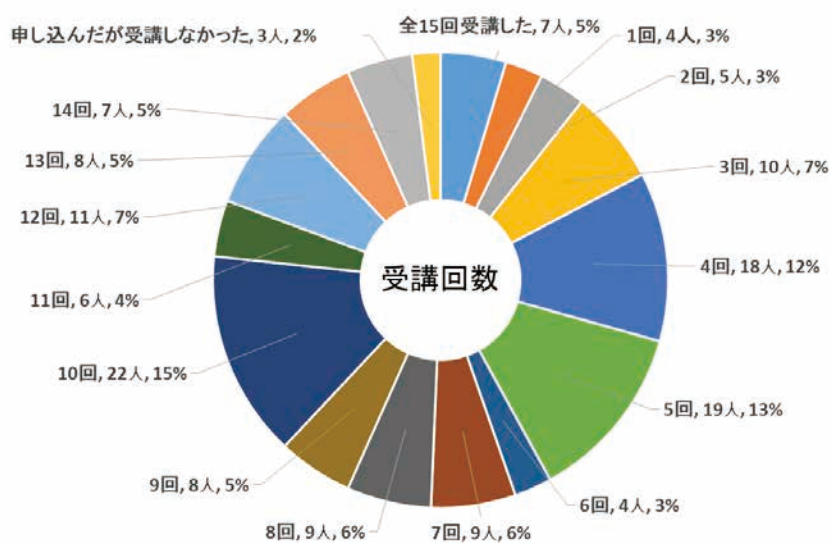


#### 2. 講義を知ったきっかけについて（回答数が多かったもの）

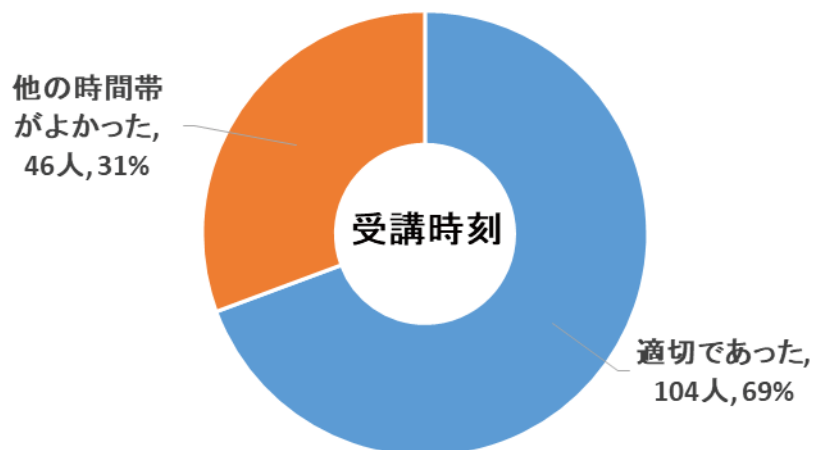




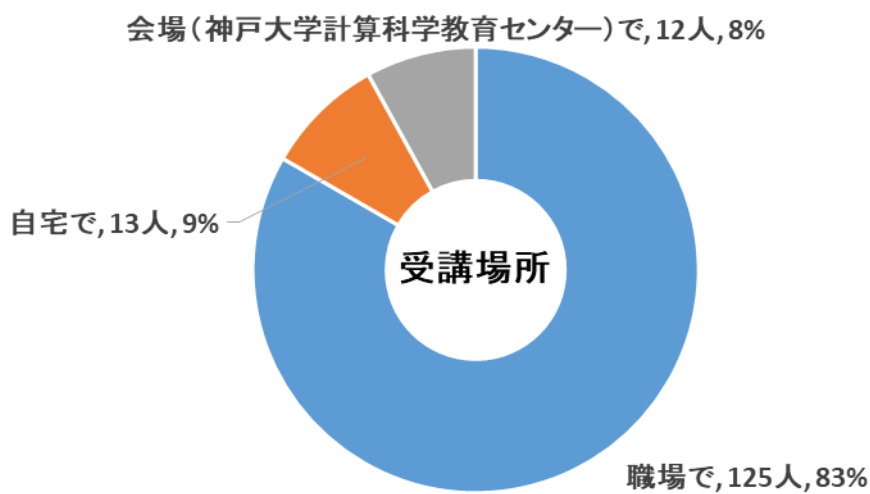
## 3. 受講回数



## 4. 講義時刻について

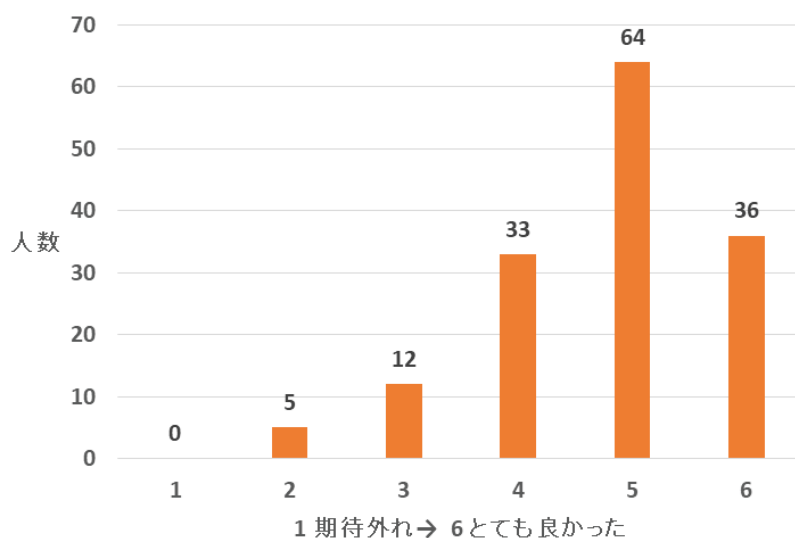


## 5. 受講場所について



## 6. 講義全体の感想について

- ・最近流行の話題を入れていただきながら、従来技術との歴史や技術の違いを解説いただいたのが勉強になりました。
- ・クライオ電顕は名前だけ聞いたことがあったのですが、仕組みにもついて聞いて面白かったです。構造インフォマティクスも興味があったのでお話を聞いて良かったです。
- ・以前も受講しているが毎年内容がアップデートされており、新しい情報が得られる。幅広い分野・所属の先生の講義を聴講できる。
- ・専門としている業務（統計解析）以外の部分は難しかった。しかし、新しい地域なので興味深く受講できた。
- ・数学系の研究者に向けたバイオインフォマティクス分野の講演を扱ってほしい。
- ・生命科学（特に医療）の分野に置いて、AIの活用が急速に進みつつある。すでに活用されている、或いは検討されている事例をもとに、将来の展望（可能性）を推測するような講義をお願いしたい。
- ・計算科学はなじみが無い者からするとなかなか頭に入りにくいので、今回のような基礎から創薬の応用をまたやっていただけるとありがたいです。
- ・ドッキングスタディや機械学習に興味があります。しかし有機化学出身で計算やコンピュータに明るくないため、取り組むのが難しい状況です。有機化学者の立場からでも行えるように、基礎的なところからソフトの紹介や使用方法の説明、応用事例などを教えていただくような講義を希望します。そういった分野を扱う講習会がなかなか見つからないため、あると大変貴重かと思えます。
- ・医薬品の臨床開発における人工知能の開発・利用に関する情報を集めています。人工知能そのものに関する講義も良いのですが、今何が出来て、何年後にはどこまで出来るようになるのかといった、より具体的・実践的なお話を伺える講義を希望します。



## 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ホームページ e ラーニングアーカイブ ([https://www.r-ccs.riken.jp/jp/course/course-base\\_2017](https://www.r-ccs.riken.jp/jp/course/course-base_2017)) にて公開。



計算生命科学の基礎Ⅳ 計算生命科学の概要①

### 計算生命科学の基礎 (2017)



- |            |    |      |  |
|------------|----|------|--|
| 2018.01.17 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ 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</a> |
| 2017.12.06 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ 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</a>          |
| 2017.11.29 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ 生命系の分子動力学シミュレーション</a>                         |
| 2017.11.22 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析</a>                      |
| 2017.11.15 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ フラグメント分子軌道法に基づく創薬分子設計の現実と課題</a>               |
| 2017.10.25 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ 電子顕微鏡解析</a>                                   |
| 2017.10.18 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ ゲノミクスからの構造インフォマティクス</a>                       |
| 2017.10.04 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎Ⅳ 計算生命科学の概要</a>                                 |

Copyright © 理化学研究所 計算科学研究センター <http://www.r-ccs.riken.jp/jp/> 神戸大学計算科学教育センター<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/>



神戸大学 計算科学教育センター

企画協力: 日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げています。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野に大きな影響を及ぼし、知識の融合を促し研究分野のパラダイムシフトを現実のものにしています。その原動力となっているものの一つがコンピュータを活用する計算生命科学です。計算生命科学はDNAに刻み込まれたゲノム情報、タンパク質の構造情報、ヒトレベルでの健康・疾患情報などを含むビッグデータを解析・システム統合し、シミュレーションでの予測によって生命を理解し、医療分野への応用の基盤となる学際領域です。今後、データサイエンスやAI技術などの新たな科学領域や技術と組み合わせて、次世代技術・知識が創生される舞台となります。この遠隔講義は、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お持ちの様々な方々に、その基礎と今後の展望を学んでいただき、様々な分野で基礎から応用までの研究開発を支える人材の育成を目指しています。

遠隔インタラクティブ講義

# 計算生命科学の基礎IV

計算科学と生命科学の融合

基礎から医療・創薬・人工知能への応用まで

## 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

- 鶴田宏樹 神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/工学研究科 准教授
- 岡田随象 大阪大学大学院 医学系研究科 遺伝統計学 教授
- 白井 剛 長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授
- 川端 猛 大阪大学蛋白質研究所 寄附研究部門 准教授
- 瀬々 潤 産業技術総合研究所 人工知能研究センター機械学習研究チーム チーム長
- 平野敏行 東京大学 生産技術研究所 助教
- 福澤 薫 星薬科大学 薬学部 准教授
- 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
- 池口満徳 横浜市立大学大学院 生命医科学研究科 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
- 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
- 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 兼 滋賀大学データサイエンス学部 准教授
- 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
- 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
- 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

2017.10.4(水) → 2018.1.24(水)

毎週水曜日 [全15回]  
17:00-18:30

インターネット受講 神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信

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、理化学研究所生命システム研究センター 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機構、計算科学振興財団 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

🔍 計算生命  
➤ プログラム詳細はこちら!  
スケジュールは裏面へ



# 計算生命科学の基礎Ⅳ スケジュール

## 10.4 [水] はじめに 計算生命科学の概要

神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/  
工学研究科 准教授 鶴田 宏樹

生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げている。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野へ大きな影響を及ぼしている。その原動力となっているものの一つがコンピュータを活用する計算生命科学である。本講義では、計算生命科学を取り巻く環境と将来について理解を促しつつ、講義全体の導入紹介を行う。

## 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

### 10.11 [水] 遺伝統計学の基礎と応用

大阪大学大学院 医学系研究科 遺伝統計学  
教授 岡田 随象

遺伝統計学 (statistical genetics) は、遺伝情報と形質情報の関わりを統計学の観点から研究する学問分野であり、一次的に処理されたゲノム情報を適切に解釈し、社会還元するためのデータ解析学問として注目されている。大規模ヒト疾患ゲノム解析により同定された数多くの疾患感受性遺伝子の情報を、多彩な生物学・医学データベースと分野横断的に統合することにより、新たな疾患病態の解明や、疾患バイオマーカーの同定、新規ゲノム創薬、疾患疫学の謎の解明、等に貢献できると期待されている。

### 10.18 [水] ゲノミクスからの構造インフォマティクス

長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部 教授 白井 剛

大規模ヒト疾患ゲノム解析により疾患関連変異の探索は極めて効率化されたが、通常その情報を疾患メカニズムから創薬などの応用へ繋げるためには、分子構造の解析が必要になる。このとき、ゲノム情報量と分子構造情報量のギャップが問題となるが、構造インフォマティクスはこのギャップを埋めるための手段である。この講義では、なるべく具体例を示しながら超分子モデリング、相互作用予測、疾患変異マッピング解析などの手法について解説する。

### 10.25 [水] 電子顕微鏡解析

大阪大学 蛋白質研究所 寄附研究部門 准教授 川端 猛

近年、低温電子顕微鏡の単粒子解析による3次元分子構造の解析技術が大きく進展し、X線結晶解析・NMRに並ぶ第三の構造解析技術として定着しつつある。この進歩は、電子直接検出器などのハードウェアの刷新とともに、EMAN2、Relionなど優れた画像処理プログラムの開発によるもの大きい。本講義では、単粒子解析の情報処理の各技術(2D画像分類、3D画像再構成、原子モデリング)を順に説明し、大量の2D画像データ群から高解像度の3D画像と原子モデルを推定するための計算法を概説する。

### 11.1 [水] 機械学習・人工知能技術入門

産業技術総合研究所 人工知能研究センター  
機械学習研究チーム チーム長 瀬々 潤

生命科学から算出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、農学へと繋げていく期待は高い。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、いわゆる人工知能の導入を行う。その上で、計算生命科学への応用に関する現状と議論を行う。

[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)、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)、鶴田 宏樹(神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/工学研究科 准教授)、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 研究支援推進員)

## 第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

### 11.8 [水] 計算生命科学のための量子化学基礎

東京大学 生産技術研究所 助教 平野 敏行

量子化学シミュレーションは、実験化学と相補的に用いることで物性・化学反応の解明に威力を発揮する、強力な研究方法である。コンピュータの性能向上と計算手法の進歩により、これまで難しいと考えられてきた大規模生体分子の量子化学シミュレーションが実用的になりつつある。量子化学シミュレーションの理解を助ける量子化学計算理論・計算法や分子生物学の基礎から、最新のタンパク質カニカル量子化学計算について紹介する。

### 11.15 [水] 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

星薬科大学 薬学部 准教授 福澤 薫

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のが期待されている。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。

### 11.22 [水] QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析

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 蘆野 優

タンパク質は巨大かつヘテロな系であり、機能を有効に発揮できるように、その「かたち」を変化させる。タンパク質機能の理解・予測に、機能発現に関わる局所部分(活性中心)には量子力学(QM)を、活性中心を取り囲むタンパク質の「かたち」の変化には古典力学(MM)を適用したQM/MM法は極めて有効である。本講義ではQM/MM法の理論背景からはじめ、タンパク質の機能解明への応用について紹介する。

### 11.29 [水] 生命系の分子動力学シミュレーション

横浜市立大学大学院 生命医科学研究科 教授 池口 満徳

生体分子モーターなど、多くの生体分子は動くことで機能している。そのような生体分子の動きについて、コンピュータによって研究する方法が分子動力学シミュレーションである。本講義では、分子動力学シミュレーションの基礎から、タンパク質や核酸などの生体分子に適用した事例まで解説する。

### 12.6 [水] 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

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

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、構造生物学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。

## 第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用

### 12.13 [水] 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〜

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 本村 陽一

ビッグデータを活用する人工知能技術に大きな期待が寄せられている。実社会で生成される各種のビッグデータを活用する人工知能技術として機械学習の発展が近年爆発的な性能向上をもたらした。本講義では機械学習分野に概観と、その中で不確実な現象のモデル化に用いられる確率モデリング技術の基礎と応用について解説する。

### 12.20 [水] ヒトを対象とした医学研究のデザインと解析手法

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  
兼 滋賀大学データサイエンス学部 准教授 田中 佐智子

ヒトの健康・疾病に関連するリスク要因を探索する場合、ヒトを対象とした医学研究の実施が必要となる。本講義では、健康人10万人を追跡した大規模研究において、遺伝子・バイオマーカーなどのリスク要因を評価するための研究デザインと解析手法を紹介する。また、患者を対象とした医学研究のデザインと解析手法についてもふれ、高次脳神経機能やバイオマーカーの評価の実例を紹介する。

### 1.10 [水] 計算システム生物学と創薬

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。

### 1.17 [水] 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

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 本間 光貴

近年の創薬において、タンパク質-リガンド間のドッキングによるインシリコスクリーニングは無くしてはならないものとなっている。また、現場の創薬ではヒットが得られた後の活性やADMETプロファイルの向上を目指した設計も重要である。本講義では、インシリコスクリーニングの精度を向上させるためのポイントについて説明するとともに、ヒットが得られた後の設計手法についてAMEDの創薬インフォマティクスシステム構築で開発中の毒性予測モデル等を含めて紹介する。

### 1.24 [水] Real World Data: 統計学が疫学をコンピュータサイエンスか

塩野義製薬株式会社解析センター 元センター長 田崎 尚信

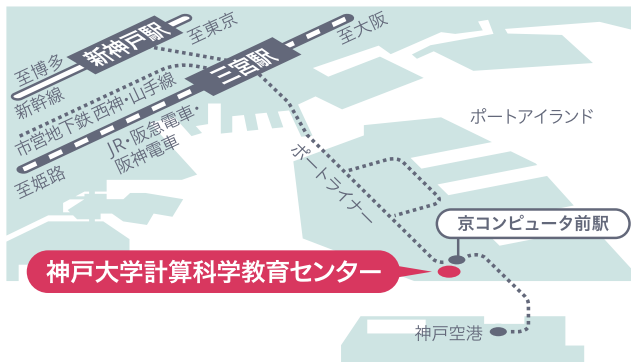
統計学を愛するがゆえにデータマイニングを学び、統計学を愛するがゆえに機械学習を学び、そしていまは、統計学を愛するがゆえに疫学を学んでいる。いまの疫学は昔とくらべ格段にてごわく、社会科学分野の「実証分析」にも応用されている。ずいぶん(数十年)前になるが、神戸大学の計測工学/システム工学で統計学を非常勤で14年間教えた。そこでは学生から多くのことを学んだ。その経験を踏まえ、医療データの解析で存在感を持ち続けている統計学を紹介したい。

## 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\\_science4/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science4/)

## 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 ✉ office@eccse.kobe-u.ac.jp

## 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」

### 概要

遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」実施4年目を迎え、これまでのアンケート回答で要望が多かった実践的な内容のプログラムの実施を試みた。特別編として「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル」というタイトルで、生命科学における人工知能研究の現状や、ディープラーニングの原理について講義を行い、Pythonというプログラミング言語を用いて簡単なプログラムの実行と解説を行った。

### 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

### 主催

神戸大学計算科学教育センター

### 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。  
(実習の配信は無し)

### 担当講師

- ・石田貴士 (東京工業大学)
- ・種石慶 (理化学研究所)
- ・渡邊博文 (神戸大学計算科学教育センター)
- ・TA: 八木学 (理化学研究所 計算科学研究機構)
- ・TA: 鈴木洋介 (神戸大学計算科学教育センター)

### 講義内容

**【講義】「生命科学におけるAI研究の現状」 講師：石田貴士 (東京工業大学)**

複雑で原理の解明が困難な現象を扱う生命科学の分野では、タンパク質の2次構造予測を筆頭に機械学習などの人工知能 (Artificial Intelligence, AI) の技術が利用されてきた。近年、深層学習の登場により画像認識や自然言語処理などで劇的な改善がえられ、自動運転などの技術が現実のものとなりつつあるが、生命科学の分野でも深層学習は大きな威力を発揮しつつある。本講義では最新の事例を含め生命科学分野におけるAI技術の応用例を概観する。

**【講義】「ディープラーニングの計算原理」 講師：種石慶 (理化学研究所)**

いまやディープラーニング技術は抽象化の進んだフレームワーク等で提供され、専門家

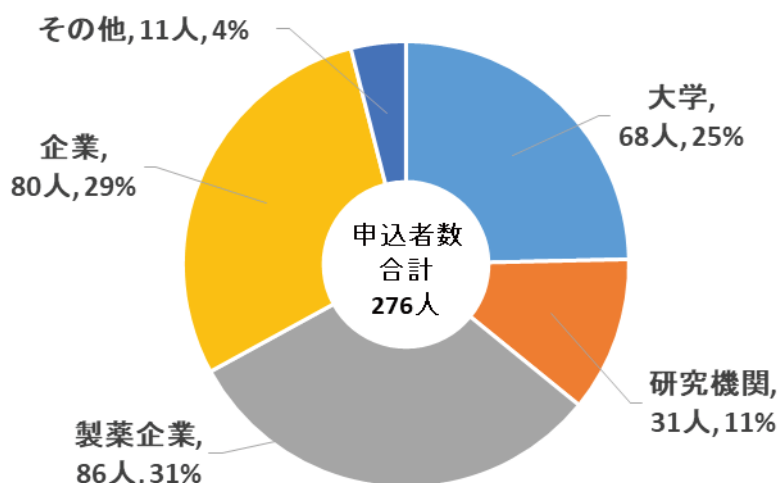
でなくとも使える環境が整ってきた。その一方で、抽象化に隠された原理を知ること、効率的なチューニング、さらには応用範囲を広げるために重要である。本講義ではディープラーニングの原理について、それを可能にする計算技術と共に紹介する。

**【実習】「Python+Tensorflow を用いた実習」 講師：渡邊博文（神戸大学）**

現在、人工知能(AI)の分野は注目を集めており、無料で使えるライブラリをインターネットからダウンロードし、Python というプログラミング言語を用いて入門者でも簡単に学習を始めることが可能である。この実習では、Python 言語と Google が開発している Tensorflow というライブラリを用いて、簡単なプログラムの実行と解説を行い、ニューラルネットワークによる画像認識の課題に取り組む。

### 受講登録者状況等

276 人（会場参加 12 人を含む）（最終）



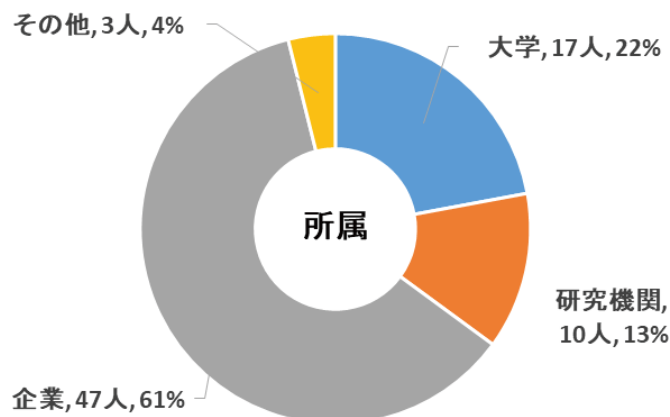
### 受講者アンケート（チュートリアル終了後）

**【調査概要】**

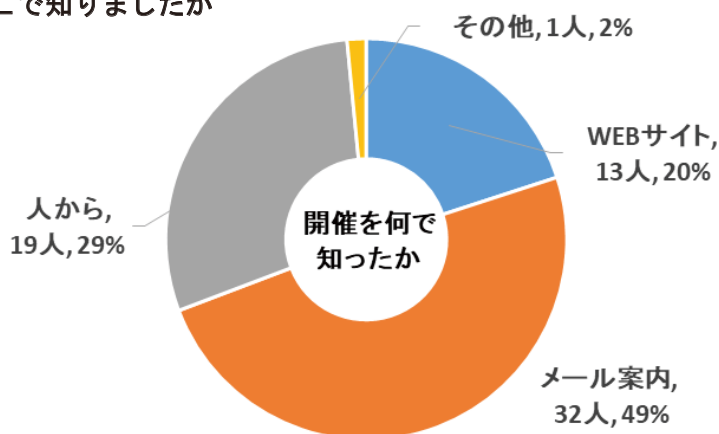
1. 対象 「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル」の受講登録者
2. 標本数 276人（2017年9月18日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査期間 2017年9月20日（水）～2017年9月29日（金）
5. 回収数 77人（会場12人、WEB65人）
6. 回収率 約27.9%

【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. 開催をどこで知りましたか



### 3. チュートリアル感想

- ・ディープラーニングの現状や計算生命科学への応用例、課題が講義でよく分かった。巷で話題になっている（成功例）の画像分野だけで、我々の分子関連では課題が多いことに驚いた。
- ・とてもわかりやすい言葉で伝えていただけた。創薬化学に近い分野の応用例を紹介いただき、機械学習についてより深い興味が湧いた。
- ・生命科学系における真相学習の長所と短所が簡潔に知れたので有用でした。
- ・プログラムの知識は、大学程度で多少ありましたが、難しく感じました。ただ、プログラミングの全体的なイメージについては学ぶことができました。用語がついていけない所がありロジスティック解析、カオス理論やエントロピーなどの用語解説は口頭ではなく資料があればなお、良かったと思います。
- ・ディープラーニングに関する理解が不十分でまだという自分の研究において応用してよいかわかりませんが、これをきっかけに勉強していきたいと思っています。
- ・初めてTensorflowを使って見たが利用しやすいと思った。DLを使うネタは今のところ無いがいつか使ってみたい。



## 概要

大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会 (AXIES2017) (2017/12/14 広島国際会議場) 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」というタイトルで講演し、本講義のインターネット配信環境構築、その実施状況、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、大学関係者約 646 名、企業関係者約 536 名の 1,182 名。

[開催日時] 2017 年 12 月 13 日 (水) ~15 日 (金)

[会場] 広島国際会議場 〒730-0811 広島市中区中島町 1 番 5 号 (平和記念公園内)

[主催] 一般社団法人 大学 ICT 推進協議会

[共催] 国立大学法人 広島大学

[後援] 文部科学省、広島県、広島市、広島県教育委員会、広島市教育委員会

[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」

発表者: 渡邊博文 (神戸大学計算科学教育センター)

## 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」

渡邊博文<sup>1)</sup>, 鈴木洋介<sup>1)</sup>, 近藤洋隆<sup>1)</sup>, 石野麻由子<sup>1)</sup>, 土井陽子<sup>2)</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>, 白井英之<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) 理化学研究所生命システム研究センター
  - 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) 神戸大学科学技術イノベーション研究科
- hirofumi.watanabe@port.kobe-u.ac.jp

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

Hirofumi Watanabe<sup>1)</sup>, Yosuke Suzuki<sup>1)</sup>, Hiroataka Kondo<sup>1)</sup>, Mayuko Ishino<sup>1)</sup>, Yoko Doi<sup>2)</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>, Hideyuki Usui<sup>1)</sup>, Mitsuo Yokokawa<sup>1)</sup>

- 1) Education Center on Computational Science and Engineering, Kobe University
- 2) Quantitative Biology Center, 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

### 概要

計算生命科学は、生命の理解に向けて、スーパーコンピュータによるシミュレーション技術、ゲノム情報やタンパク質の配列・構造情報を利用するビッグデータ処理技術、ディープラーニングなどの人工知能 (Artificial Intelligence) 技術を駆使し、近年急速に進展している計算科学と医農工学分野が融合した学際的研究領域である。多くの新しい成果が創出されており、様々な研究分野や産業界等への研究の広がりが期待されているが、新しい研究領域であ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た。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、昨年度は 500 名以上の受講登録受け付けた。本稿では、本講義のインターネット配信環境構築、その実施状況、課題等について報告する。

### 1 はじめに

ゲノム情報、RNA 配列情報、タンパク質構造などのデータベースの整備や、スーパーコンピュータによる計算機シミュレーション技術の発達により、「計算生命科学」の研究分野は大きな発展を遂げている。この研究分野は、創薬や有用物質の生産などの様々な応用が期待されるため、大学や研究機関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、最先端の研究の現状を網羅的に習得する場や、研究分野全体を網羅的に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、学術・産業イノベーション創造本部、理化学研究所 HPCI 計算科学生命科学推進プログラム[1]、その他の組織・機関が協力して、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、全国に配信している。過去 3 回のシリーズでは、生命科学のデータベース、統計学、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[2]。4 回目となる今年度も、バイオインフォマティクスなどの新しい分野を加え、10 月

より遠隔講義を開始したところである[3].

本稿では、本遠隔講義のインターネット配信環境の構築、講義内容、受講状況や受講者の意見について報告する。

## 2 配信システム

### 2.1 WebEx Event Center について

動画配信サーバを自前で構築する場合には、多くのコンピュータからの接続時に、サーバの台数を増やし負荷分散をさせるなど、環境構築が困難なケースが多い。このため、配信システムは、WebEx Event Center を利用して構築を行った。WebEx は、Cisco 社の提供する遠隔会議や、遠隔イベントを行うためのクラウド型の有償サービスであり、自前で配信サーバを構築することなく、Cisco 社の提供するサーバに対して、各受講者が各自の PC から Web ブラウザを用いて接続することで講義の視聴が可能である。

WebEx Event Center は、配信元が1つ、または少数のコンピュータで、多数の一般の視聴者へ向けて配信する場合のサービスであり、今回のような遠隔講義の用途に適している。テレビ会議用の Meeting Center では、会議を立ち上げる「主催者」と「参加者」の区別しか出来ないのに対して、Event Center では、参加者に「パネリスト」と「出席者」の区別があり、パネリストのみが画面共有の送信元である「プレゼンター」となることが可能である。また、「出席者」に対して、音声入力を受け付けない設定や接続開始時にミュートする機能があるため、一般の参加者を「出席者」、スタッフの接続するパソコンを「パネリスト」とすることで、一般の参加者からの音声を入力させないことが可能であり、参加者 PC からの誤った操作によるノイズを抑えることが出来る。また、WebEx は、スマートフォンにも対応しているため、パソコンが無いようなオフィス外の環境でも視聴が可能である。実際にパソコン以外から講義を受講している参加者が多数存在している。さらに、参加者側の PC をプロジェクターに接続することで、多人数が視聴可能なサブ会場を作ることにも可能である。

### 2.2 配信システムの構成

図1に、配信システムの映像部分の構成図を示す。パワーポイントなどで作られた講義スライドは、プレゼンターPCの画面共有機能を用いて配信する。講義が行われているセミナー室の様子は、Web カメラからの映像を取り込み、主催者 PC か

ら配信する。WebEx サーバへの映像情報の送信は、十分な通信帯域の確保が必要である。そのため、プレゼンターPC 及び主催者 PC は、無線 LAN で



図1 配信システムの構成図（映像）



図2 配信システムの構成図（音声）

はなく有線LANによる接続を行った。また、映像が正常に配信されているか確認するための監視用PCも用意した。このPCもある程度の帯域を確保しておかなければ、帯域不足により、満足に配信状況の確認ができないため、有線もしくは、同じ部屋に置かれた他のPCからの接続が少ない無線LANアクセスポイントを通じた接続を行った。会場参加者向けのプロジェクター映像と録画は、プレゼンターPCのアナログRGBまたは、HDMIから出力し映像信号の分配器から、それぞれ機器に接続している。

次に、図2の音声部分の構成図を示す。会場となるセミナー室のマイクからミキサーを通して、音声信号を分配し、主催者PC、スピーカー、録音装置それぞれに接続することで、WebExによる遠隔配信、会場での拡声、録音の機能を実現してい

る。簡易的な接続方法として、主催者 PC への Bluetooth 方式のワイヤレスマイクを入力し、音声を入力する方法があるが、講師の声をハンドマイクにより会場のスピーカーから出す場合には、講師が1人で、マイクを2つ使うこととなり、煩雑であるのに対して、図に示した構成では、1つのマイクのみを使用し、マイクへの音声入力が会場のスピーカーから聞こえている場合、自動的に遠隔配信や、録音機器へも音声信号が出力されていることが直感的にわかるという利点がある。

### 2.3 受講者の募集と受け付け

受講者の募集は、開催案内のポスター掲示、チラシの配布、メーリングリストによる配信、共催機関の Web サイトでの掲載などで行っている。初年度は、共催の関係機関等へのポスター掲示、チラシ配布、関係者を介した広報活動に努めた。また、講義スタッフが所属する関係学会等におけるチラシの直接配布や、関係学会のメーリングリストやメールマガジンを利用して開催案内を配布した。

2年目から、前年度の受講者の所属大学等約120機関にもポスターの掲示をお願いするとともに、情報提供を希望する過去の受講者にもメールによる案内を行った。

受講者の受付は、計算科学教育センターの Web サイトから行った。受講希望者は、遠隔講義のページにある応募フォームに必要事項を記入、送信することにより、自動的に受け付けが完了するようにした。受講希望者には受付完了のメールが届く。

### 2.4 イベント招待状メールの送付

講義を視聴するためには、そのイベント用の WebEx 接続 URL が必要となる。接続 URL の配布は、受講者全員を登録したメーリングリストを作成し、WebEx の接続用 URL を記入した招待状メールを一斉配信することで行っている。

### 2.5 過去の講義のアーカイブ化

配信された講義の一部は、理化学研究所計算科学研究機構が提供する e-learning 教材として公開されている [4]、2015 年度のコンテンツ制作は、まず、パソコン画面からの出力、ビデオカメラの映像、WebEx の録画機能による映像をセンターでとりまとめ、映像制作会社に編集を行ってもらった。2016 年度は撮影も含めて、編集を映像制作会社に行ってもらった。アーカイブの動画配信プラットフォームには YouTube を用いており、構築の手間を省きつつ、多数のアクセスにも耐えられるようになっている。

### 2.6 遠隔参加者からの質問の扱い

講義の最後に、視聴参加者から質問をいくつか受け付けている。当初は、参加者から直接音声による質問受け付けを試みたが、複数の参加者の PC から音声が入り、混乱が生じたため、現在は WebEx のチャット機能を用いて、テキスト入力による質問を受け付ける形態にした。入力された質問は、会場の担当者が読み上げ、その場で、講師から回答をもらっている。

## 3 講義内容について

遠隔講義全体のテーマ、講師、及び講義内容は、スタッフの中の企画コーディネーターが決定している。15回の講義は、3編にわかれており、2017年度を例にすると、「ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎」、「構造生命科学のための分子シミュレーション」、「計算生命科学の医療・創薬への応用」となっている。個々の講義のテーマは、計算機シミュレーション、システムバイオロジー、創薬に関連するものが多い。また、2016年度からは、日本バイオインフォマティクス学会、CBI 学会の企画協力を受けたことから、バイオ

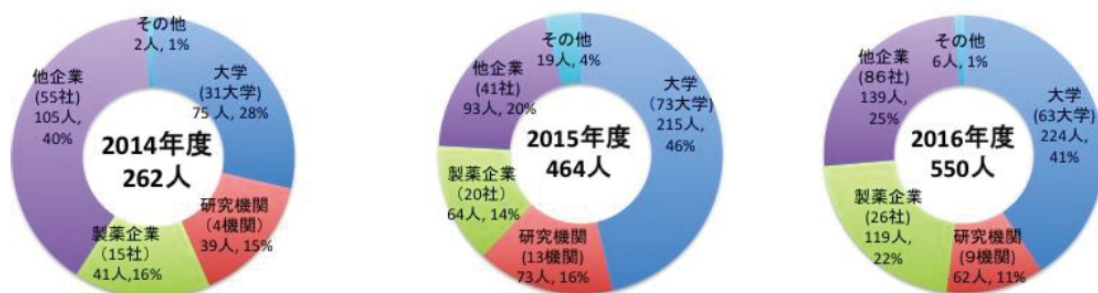


図3 過去3年間の受講登録者数の推移と所属の内訳

ンフォマティクス関連の内容が充実した。

## 4 受講状況、受講者の意見

### 4.1 過去3年間の受講登録状況について

2014年度、2015年度、2016年度の受講登録者はそれぞれ262人、464人、550人となっており、登録者数の伸びが見られる(図3)。概ね半数は企業関係者であり、その約半分が製薬企業となっており、産業応用をみすえた大学外からの関心が高いことがわかる。また、大学関係者(教員、学生を含む)の登録者は4割程度、かつ全国に分布しており、本講義の全国的な広がりが見えた。残りは研究機関などからの登録者である。これらの状況から、本講義の価値が認められていると考えている。

### 4.2 受講後のアンケート結果より

2016年度のすべての講義が終了した後に、全受講登録者を対象としたアンケートを実施した。受講登録者550人中138人から回答を頂いた。結果は、以下の通りとなった。

まず、受講者の本講義視聴のきっかけを図4に示す。Webサイトやメーリングリスト等の電子媒体による案内が大半を占めるものの、ポスターやチラシなど紙媒体による案内も一定の役割を果たしていると言える。また「知人等から」という個人的なつながりをきっかけも重要となっている。様々なメディアの活用的重要性が示されている。

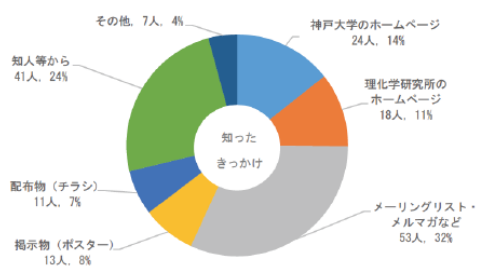


図4 講義視聴のきっかけ

受講後の結果としては「とてもよかった」、「良かった」、「期待はずれだった」の3択でアンケートを行ったところ、「とてもよかった」と「よかった」を合わせると9割を超えている(図5)。また「とてもよかった」も4割近くを占め、講義内容については受講者の満足が得られたと評価できる。

講義全体に対するコメント、感想等では、「どこでもインターネット環境があれば受講できる点がよかった」という遠隔講義を評価する感想や、「国内の第一級の研究者による遠隔講義は大変興味深くありがたい。企業として今後の研究開発や人材採用の参考になると感じている。」などといった、企業内で活用可能であるという意見がよせられた。

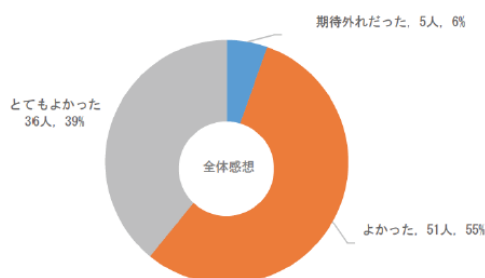


図5 講義視聴後の感想

### 4.3 今年度の登録状況について

今年度9月末時点での受講登録者数は459人(昨年度は449人)である。事前アンケートを見ると、今年も約半数が企業関係者である。

講義は途中からの参加も可能であり、また一部の講義だけを受講することも可能である。皆様のご参加を歓迎したい。

## 5 まとめ

本報告では、計算生命科学に関する基礎についての遠隔インタラクティブ講義の実施状況についてまとめた。これまで、延べ約1300人の受講者登録があり、その講義内容については、多くの聴視者から高い評価を頂いた。今年度も10月4日より配信している。本講義で対象とする研究分野は、現在も急速に発展し続けており、新しいテーマを対象にしつつ、講義を継続的に配信したいと考えている。現在、予算、運営体制など解決しなければならないいくつか課題があり、継続的な運営のための資金確保に努めていく必要がある。

### 謝辞

本遠隔講義の実施に当たっては、神戸大学名誉教授賀谷信幸先生(元計算科学教育センター長)、東北大学大学院情報科学研究科教授木下賢吾先生、理化学研究所計算科学研究機構研究員八木学氏をはじめとして、多くの方々にご協力頂いた。また、

科学技術振興調整費や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機構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] <http://www.scls.riken.jp/>
- [2] 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>)
- [3] [http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distnce\\_learning/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distnce_learning/)
- [4] <http://www.aics.riken.jp/jp/course/course-base>

2018年度  
計算生命科学の基礎 V





## 目的

現代の生命科学は、急速な変革を遂げつつあります。その変革の原動力は、生物の大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と、それに促された計算機科学・シミュレーション科学・人工知能学・データサイエンスなどの研究分野の緊密な連携、すなわちコンピュータを活用した計算生命科学の進歩です。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多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、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を理解することを目指します。その急速な発展は農学や医学の分野にも大きな影響を及ぼし、ゲノム医療などの応用も実現しつつあります。計算生命科学は、現代の生命科学の推進に不可欠な知識を提供します。この遠隔講義では、CBI学会・日本バイオインフォマティクス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、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：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

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)

鶴田 宏樹 (神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/工学研究科 准教授)

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)

### ▼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）  
石野 麻由子（神戸大学計算科学教育センター）  
八木 学（理化学研究所 計算科学研究センター）  
土井 陽子（理化学研究所 生命機能科学研究センター）

## 開催日程

---

2018年10月3日～2019年1月23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

---

- ・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）
- ・加藤 護（国立がん研究センター研究所バイオインフォマティクス部門 部門長）
- ・山西 芳裕（九州工業大学大学院情報工学研究院生命情報工学研究系 教授）
- ・神田 大輔（九州大学 生体防御医学研究所 教授）
- ・金谷 重彦（奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 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）
- ・福澤 薫（星薬科大学薬学部 准教授）
- ・松林 伸幸（大阪大学大学院基礎工学研究科化学工学領域 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）
- ・森 聖治（茨城大学大学院理工学研究科 教授）
- ・都地 昭夫（塩野義製薬株式会社 デジタルインテリジェンス部 グループ長）
- ・北西 由武（塩野義製薬株式会社 解析センター グループ長）
- ・由良 敬（お茶の水女子大学 シミュレーション科学・生命情報学教育研究センター 教授／早稲田大学 先進理工学部生命医科学科 教授）
- ・本間 光貴（理化学研究所 生命機能科学研究センター 制御分子設計研究チーム チームリーダー）
- ・國澤 純（医薬基盤・健康・栄養研究所 ワクチンマテリアルプロジェクト&腸内環境システムプロジェクト プロジェクトリーダー）
- ・西田 知史（情報通信研究機構 脳情報通信融合研究センター 研究員）

<p><b>はじめに 計算生命科学の概要（担当：白井 剛、田中 成典、森 一郎）</b></p> <p>現代の生命科学は、大規模データ（ビッグデータ）の蓄積により大きな変貌を遂げつつある。全ゲノムや巨大生体分子構造を対象とした研究は、より包括的な生命の理解に貢献し、さらには医学や農学の分野での応用への道も開きつつある。これらの改革の中心にあるのは、生命を大規模データとしてとらえ、高度な計算により解析を行う計算生命科学である。本講義では、計算生命科学の基礎から最前線の研究や応用までをカバーする「計算生命科学の基礎Ⅴ」への導入として、講義シリーズ全体を概観する。</p>
<p><b>第1編 ゲノムから分子構造までの計算生命科学の基礎と実践</b></p> <p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 加藤 護「ゲノム医療のバイオインフォマティクス・パイプライン」 実験医学 2018 9 月増刊 in press</li> <li>2. 加藤 護「がんのプレジジョン・メディシン」、アンチ・エイジング医学 2017 Vol. 13, 663-669</li> <li>3. 加藤 護「最新がん個別化医療 - 臨床シーケンスのバイオインフォマティクス -」 癌と化学療法 2016 Vol. 43 391-397</li> <li>4. ゲノム創薬科学（田沼靖一編集），裳華房，2017.</li> <li>5. Chemoinformatics and Advanced Machine Learning Perspectives (Lodhi, H. and Yamanishi, Y., eds.), IGI Global, 2010.</li> <li>6. 神田大輔「いきなり始める構造生物学」，秀潤社，2011</li> <li>7. 八木達彦，遠藤斗志也，神田大輔「生化学の論理-物理化学の視点から-」，共立出版，2018，化学の要点シリーズ 25（日本化学会編）</li> </ol>
<p><b>1.1 「臨床シーケンスの実際—情報解析を中心に—」（担当：加藤 護）</b></p> <p>2018 年、臨床シーケンス（がんゲノム医療）が先進医療として認定された。臨床シーケンスでは次世代シーケンサーとバイオインフォマティクス技術によって数百遺伝子にわたる変異を 1 回の検査で検出し、分子標的薬を決定する。本講義では、臨床シーケンスの概要、使用されるバイオインフォマティクス技術、主治医へ検査結果が返却されるまでの情報の流れ、電子カルテとの接続や最新の統計・情報技術による未来の医療の試みを紹介する。</p>
<p><b>1.2 「機械学習によるバイオビッグデータの実践的利用（担当：山西 芳裕）</b></p> <p>近年の生命医科学では、ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム、フェノーム、インターラクトームなどの大規模オミックス情報が得られるようになった。同時に、膨大な数の化合物や薬物に関する化学構造情報や生理活性情報も蓄積されている。本講義では、機械学習（人工知能 AI の基盤技術）を駆使して、多様なバイオビッグデータの融合解析から生命科学や医療・創薬に繋げるアプローチについて紹介する。</p>
<p><b>1.3 「X 線結晶解析・NMR・電子顕微鏡・AFM を統合した相関構造解析」（担当：神田 大輔）</b></p> <p>タンパク質分子の原子レベルの立体構造に基づき、酵素などの機能発現のメカニズムが説明でき、タンパク質分子の立体構造の時間変化、すなわち動的な情報を得ることで理解を深めることができる。さらに X 線結晶解析、NMR（核磁気共鳴法）、電子顕微鏡、AFM（原子間力顕微鏡）などの複数の方法を組み</p>

合わせることで、新しい知見を得ることができる。それぞれの解析手法と複数の解析手法を統合した相関構造解析について具体例を挙げながら説明する。

#### 1.4 「二次代謝物のデータサイエンス」 (担当：金谷 重彦)

2009年、Jim Grayが「第4のパラダイム：データ集約型の科学的発見」を提唱した。第1から第3のパラダイムとは、実験を通じた仮説検証、法則を定量的に表現する方法、計算機シミュレーションである。データ・サイエンスとは、このような方法論を包括し、科学の分野間を横断し、現象を解明する。さらにはこれらの知見をもとに、政策決定などの意思決定にまでつなぐ方法論といえる。本講義では、二次代謝物におけるデータサイエンスについての研究の紹介と今後の課題について考察する。

### 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. 神谷成敏、肥後順一、福西快文、中村春木「タンパク質計算科学（基礎と創薬への応用）」、共立出版
2. 福澤 薫 「量子論に基づくタンパク質—化学物質相互作用解析～FMO創薬の実現に向けた取り組み」日本薬理学雑誌 149, 240-246 (2017).
3. 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).
4. <https://sourceforge.net/p/ermod/wiki/doc-LectureNotes/>
5. <https://sourceforge.net/p/ermod/wiki/doc-Theories/>
6. F. Jansen, Introduction to Computational Chemistry, Third Edition, Wiley (2017)

#### 2.1 「生命系の分子動力学シミュレーション」 (担当：池口 満徳)

生体分子モーターなど、多くの生体分子は動くことで機能している。そのような生体分子の動きについて、コンピュータによって研究する方法が分子動力学シミュレーションである。本講義では、分子動力学シミュレーションの基礎から、タンパク質や核酸などの生体分子に適用した事例まで解説する。

#### 2.2 「フラグメント分子軌道法に基づく構造生命科学」 (担当：福澤 薫)

フラグメント分子軌道(FMO)法は、生体高分子の全電子計算を高速かつ高精度に実行することができる量子化学計算手法である。X線結晶構造の理論的な解釈やそれに基づいた高精度な構造ベース創薬に活用できるため、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のが期待されている。講義では、FMO法に基づく最新の取り組みについて、スーパーコンピュータを活用したFMO計算結果のデータベースなども交えて紹介する。

#### 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)

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

<p>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>
<p><b>2.4 「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概説する。</p>
<p><b>2.5 「QM/MM法の概略と応用」 (担当：森 聖治)</b></p> <p>本講義では、2013年ノーベル化学賞受賞対象であり、反応の重要な部分に精度の高いQM法、その他の部分に計算コストの安いMM法を組み合わせたハイブリッド法である、QM/MM法の概略を説明し、化学反応系や酵素反応に対する応用について説明する。</p>
<p><b>第3編 健康科学・医療・創薬への応用</b></p> <p>[参考図書]</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 竹村彰通「データサイエンス入門」, 岩波新書 2018年</li> <li>2. ジェフ・エルトン「ヘルスケア産業のデジタル経営革命」, 日経BP社 2017年</li> <li>3. 平田宗一郎, 國澤純「マイクロバイオーム・感染症研究からのワクチン開発への展望」, 最新医学73a(4): 93-97, 2018</li> <li>4. 細見晃司, 國澤純「ヒトマイクロバイオームビッグデータと健康医療への応用」, 月刊化学工業69(3): 41-47, 2018</li> <li>5. 長竹貴広, 國澤純「免疫・ワクチン応答を左右する腸内環境因子としての栄養と腸内細菌」, 医学のあゆみ 264(5): 403-410, 2018</li> <li>6. 澤根健人, 國澤純「食用油を起点に形成される生体内脂質環境の構築とアレルギー疾患の制御」, 実験医学増刊 35(7): 185-190, 2017</li> <li>7. 鈴木英彦, 國澤純「ビタミンによる免疫応答の制御と疾患」, 炎症と免疫 25(1): 29-33, 2017</li> <li>8. Gojobori, T. et al. (2016) VaProS: A Database-Integration Approach for Protein/Genome Information Retrieval. Journal of Structural and Functional Genomics, 17 (4), 69-81. DOI:10.1007/s10969-016-9211-3</li> </ol>
<p><b>3.1 「医薬品業界におけるデータサイエンティスト」 (担当：都地 昭夫、北西 由武)</b></p> <p>データサイエンティストはデータを活用するために、関連データベースや解析手法に習熟し、ビジネスの観点も加味して、仮説立案と検証を提案し、サイクルを回していく役割である。本講義では、周辺技術であるIoT, ビッグデータ利活用や人工知能, シミュレーションに関する技術などの事例を交えながら医薬品業界におけるデータサイエンティストのあり方を解説する。</p>
<p><b>3.2 「さまざまな生命科学データの接続で見える新たな知見」 (担当：由良 敬)</b></p> <p>生命科学における測定技術の進展は、膨大な生命科学データの蓄積をもたらした。これらのデータを利用して、新規の関係や仮説を生み出すためには、研究者の発想を支援するツールが必要である。そこで、生命科学の新たな知見(仮説)をデータに基づいて見いだすことを実現できるプラットフォーム</p>

の構築に挑戦している。簡単なキーワードを入力することで、異なるデータベースを同時検索し、それらデータの関係を見いだすことができることをめざしている。

### 3.3 「シミュレーションとAIの融合による創薬」(担当: 本間 光貴)

近年の創薬において、インフォマティクスやシミュレーションを利用したインシリコスクリーニングは無くてはならないものとなっている。本講義では、インフォマティクスやシミュレーションの基本的な理論、創薬現場でのメリット・デメリット、最近の動向などについて事例を交えながら紹介する。また、最先端の研究として、機械学習(人工知能)的な方法や量子化学計算(FMO法)の応用などについても触れる。最後に、最近のライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)における創薬AI開発の取り組みの現状について紹介する。

### 3.4 「ビッグデータを活用した健康科学への挑戦」(担当: 國澤 純)

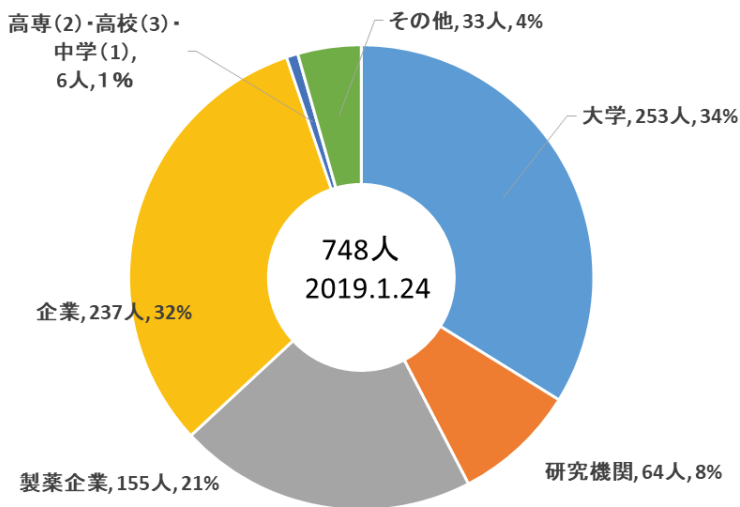
近年、腸内細菌や食品が健康に与える影響が注目されている。これらの腸内環境は個人差が大きく、また生活習慣によっても変動する。本講義では私たちが行っているコホート研究から得られた「食事などの生活習慣—腸内細菌—生体内代謝物—健康に関連する生体内因子—身体状態」に関するビッグデータを活用した研究を中心に、次世代の健康科学研究に向けた挑戦を紹介したい。

### 3.5 「脳情報の可視化とその応用」(担当: 西田 知史)

ヒトの知性は脳内の情報表現により形成されている。近年の計算神経科学の発展により、視覚・聴覚・意味などの脳内情報表現を、fMRIなどによる計測脳活動から可視化することが可能になってきている。本講義では、そのような脳内情報の可視化における最新の研究成果を紹介するとともに、成果の応用として脳情報と人工知能の融合による新技術とその産業応用の可能性について解説する。

受講登録者状況等

2018年度は748人（最終）



計算生命科学の基礎V  
申込登録者所属大学分布

2019/1/24現在

- ・国内72大学 (31都道府県)
  - ・海外2大学
- 合計253名

- ・高専2校、高等学校3校、中学校1校
- 6名



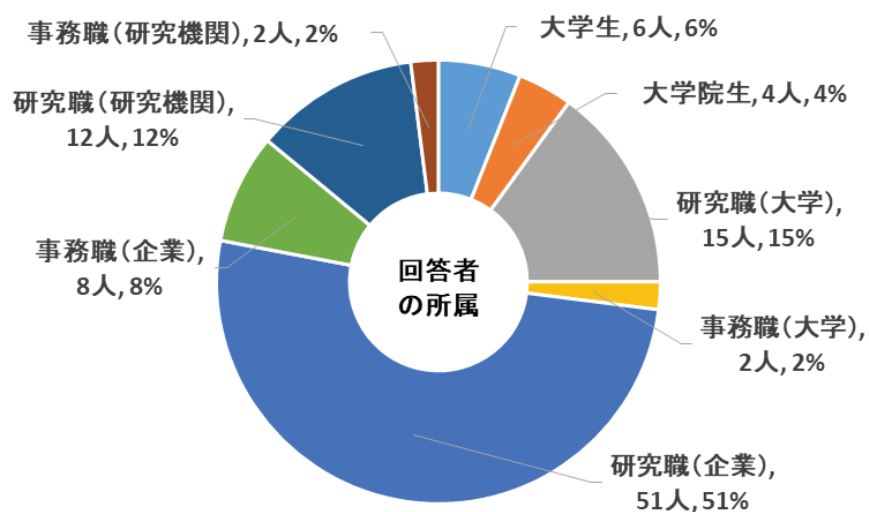
## 受講者アンケート（講義終了後）

### 【調査概要】

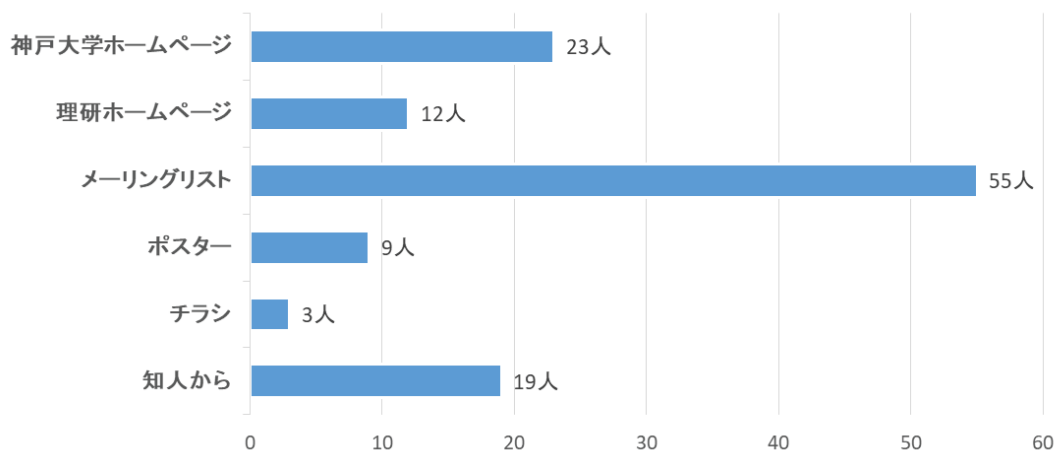
1. 対象 「計算生命科学の基礎Ⅴ」の受講登録者
2. 標本数 748人（2019年1月23日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査期間 2019年2月7日（木）～2019年2月28日（木）
5. 回収数 119
6. 回収率 約15.9%

### 【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

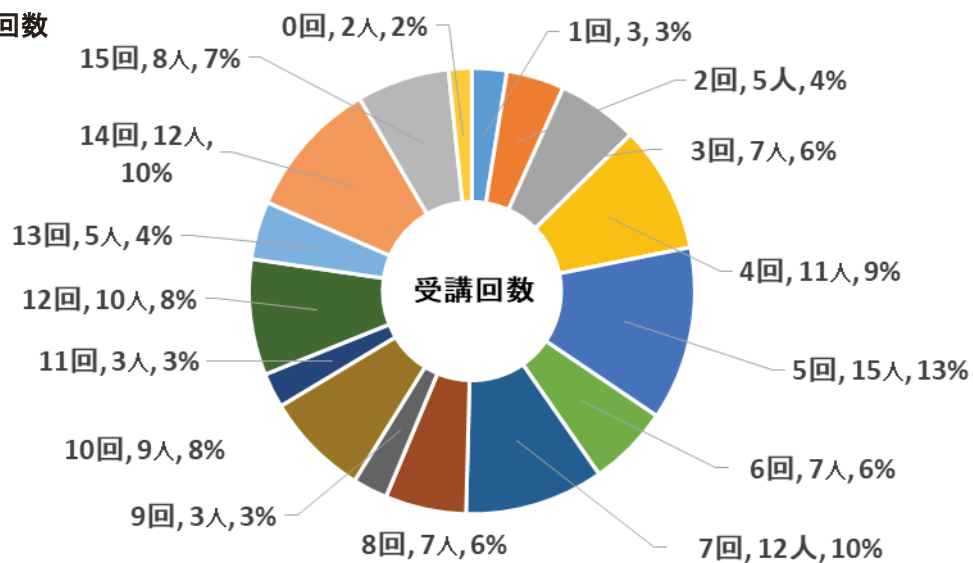


#### 2. 講義を知ったきっかけについて（回答が多かったもの）

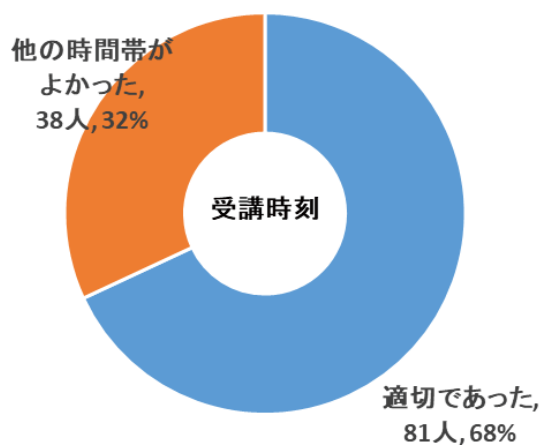




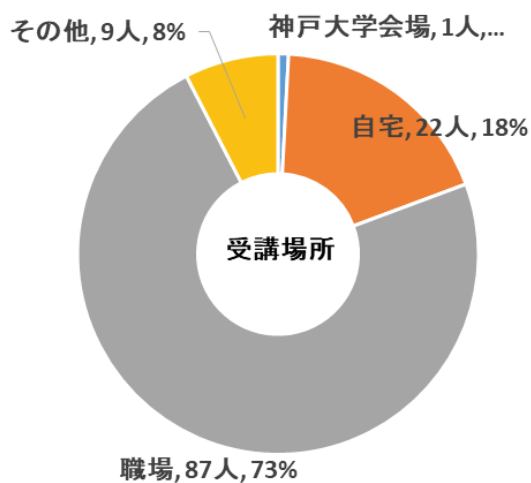
3. 受講回数



4. 講義時刻について

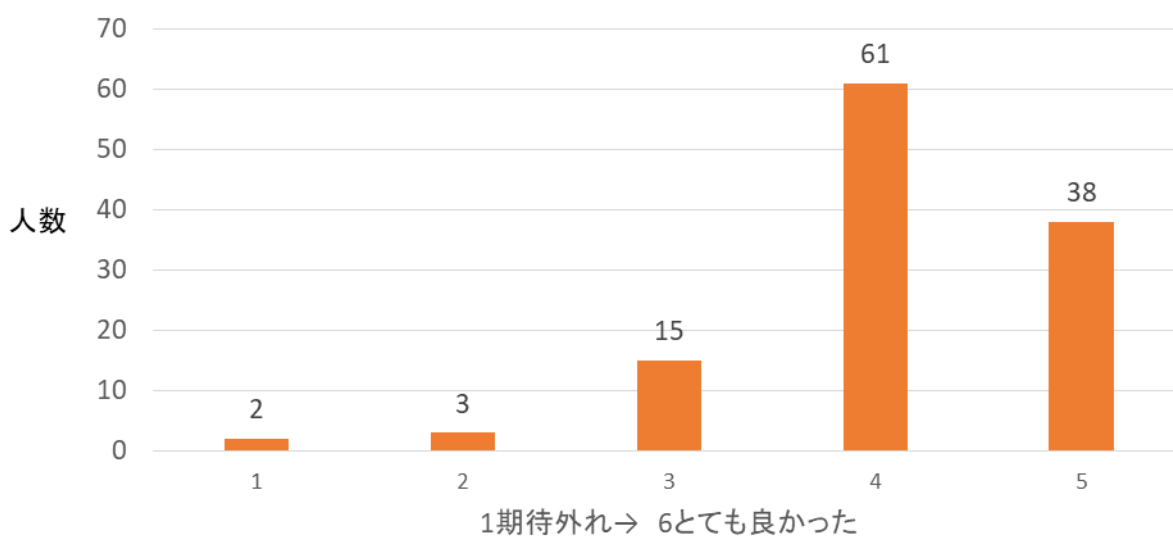


5. 受講場所について



## 6. 講義全体の感想について

- ・比較的多くの生命科学の実験系研究室にかけている統計、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かったです。
- ・遠隔でこの様に行っている講義はまだ少ないです。今後は増えると思いますが、大学の講義をこのように遠隔地で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ました。
- ・この領域に2019年4月から注力して、業務に取り入れ、方向性を模索中である現状、最新の情報・全体像の理解が深まり、調査、検討などのきっかけに大変参考になりました。
- ・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できました。また、疾患とデータの関係にも興味がありました。
- ・専門家が、総論から自己の専門分野に至る過程を講義されるものは、非常にわかりやすく、よかったです。
- ・医薬品の臨床開発における人工知能の開発・利用に関する情報を集めています。人工知能そのものに関する講義も良いのですが、今何が出来て、何年後にはどこまで出来るようになるのかといった、より具体的・実践的なお話を伺える講義を希望します。



## 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ホームページ eラーニングアーカイブ ([https://www.r-ccs.riken.jp/jp/learnmore/e\\_learning](https://www.r-ccs.riken.jp/jp/learnmore/e_learning)) にて公開。

The image shows a YouTube search bar at the top with the text '検索' (Search) and a magnifying glass icon. Below it is a large promotional poster for a lecture series. The poster features a network diagram background with nodes and connecting lines. The main text on the poster reads:   
[遠隔インタラクティブ講義] 計算生命科学の基礎V  
計算科学・データサイエンスと生命科学の融合 基礎から医療・創薬への応用まで  
<2018.10.3>  
はじめに 計算生命科学の概要  
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)  
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!  
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、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: CSI学会、日本バイオインフォマティクス学会

### 計算生命科学の基礎 (2018)



- |            |    |      |   |
|------------|----|------|---|
| 2018.12.19 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V さまざまな生命科学データの接続で見える新たな知見</a>   |
| 2018.11.28 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V 分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬支援</a>   |
| 2018.11.21 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V 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> |
| 2018.11.14 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V フラグメント分子軌道法に基づく構造生命科学</a>      |
| 2018.11.07 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V 生命系の分子動力学シミュレーション</a>          |
| 2018.10.31 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V 二次代謝物のデータサイエンス</a>             |
| 2018.10.10 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V 臨床シーケンスの実際-情報解析を中心に-</a>       |
| 2018.10.03 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V はじめに 計算生命科学の概要③</a>            |
| 2018.10.03 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V はじめに 計算生命科学の概要②</a>            |
| 2018.10.03 | 動画 | レベル2 | <a href="#">計算生命科学の基礎V はじめに 計算生命科学の概要①</a>            |

Copyright © 理化学研究所 計算科学研究センター <http://www.r-ccs.riken.jp/jp/> 神戸大学計算科学教育センター <http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/>



# 神戸大学計算科学教育センター

企画協力: CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

現代の生命科学は、急速な変革を遂げつつあります。その変革の原動力は、生物の大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と、それに促された計算機科学・シミュレーション科学・人工知能学・データサイエンスなどの研究分野の緊密な連携、すなわちコンピュータを活用した計算生命科学の進歩です。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多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、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を理解することを目指します。その急速な発展は農学や医学の分野にも大きな影響を及ぼし、ゲノム医療などの応用も実現しつつあります。計算生命科学は、現代の生命科学の推進に不可欠な知識を提供します。この遠隔講義では、CBI学会・日本バイオインフォマティクス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

## 【遠隔インタラクティブ講義】

## 計算科学・データサイエンスと生命科学の融合 基礎から医療・創薬への応用まで

# 計算生命科学の基礎V

2018 2019  
10.3 水 → 1.23 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】

- 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
- 加藤 護 国立がん研究センター研究所 バイオインフォマティクス部門 部門長
- 山西 芳裕 九州工業大学大学院情報工学研究院生命情報工学研究系 教授
- 神田 大輔 九州大学 生体防御医学研究所 教授
- 金谷 重彦 奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 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
- 福澤 薫 星薬科大学薬学部 准教授
- 松林 伸幸 大阪大学大学院基礎工学研究科化学工学領域 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
- 森 聖治 茨城大学大学院理工学研究科 教授
- 都地 昭夫 塩野義製薬株式会社 デジタルインテリジェンス部 グループ長
- 北西 由武 塩野義製薬株式会社 解析センター グループ長
- 由良 敬 お茶の水女子大学 シミュレーション科学・生命情報学教育研究センター 教授/早稲田大学先進理工学部生命医科学科 教授
- 本間 光貴 理化学研究所 生命機能科学研究センター 制御分子設計研究チーム チームリーダー
- 國澤 純 医薬基盤・健康・栄養研究所 ワクチンマテリアルプロジェクト&腸内環境システムプロジェクト プロジェクトリーダー
- 西田 知史 情報通信研究機構 脳情報通信融合研究センター 研究員

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科 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

プログラム詳細はこちら!  
スケジュールは裏面へ

計算生命 検索



# 計算生命科学の基礎V スケジュール

## 10.3 [水] はじめに 計算生命科学の概要

長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授 白井 剛  
神戸大学大学院システム情報学研究所 教授 田中 成典  
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

現代の生命科学は、大規模データ(ビッグデータ)の蓄積により大きな変貌を遂げつつある。全ゲノムや巨大生体分子構造を対象とした研究は、より包括的な生命の理解に貢献し、さらには医学や農学での応用への道も開きつつある。これらの改革の中心にあるのは、生命を大規模データとしてとらえ、高度な計算により解析を行う計算生命科学である。本講義では、計算生命科学の基礎から最前線の研究や応用までをカバーする「計算生命科学の基礎V」への導入として、講義シリーズ全体を概観する。

## 第1編 ゲノムから分子構造までの計算生命科学の基礎と実践

### 10.10 [水] 臨床シーケンスの実践—情報解析を中心に—

国立がん研究センター研究所  
バイオインフォマティクス部門 部門長 加藤 護

2018年、臨床シーケンス(がんゲノム医療)が先進医療として認定された。臨床シーケンスでは次世代シーケンサーとバイオインフォマティクス技術によって数百万塩基にわたる変異を1回の検査で検出し、分子標的薬を決定する。本講義では、臨床シーケンスの概要、使用されるバイオインフォマティクス技術、主治医へ検査結果が返却されるまでの情報の流れ、電子カルテとの接続や最新の統計・情報技術による未来の医療の試みを紹介する。

### 10.17 [水] 機械学習によるバイオビッグデータの実践的利用

九州工業大学大学院情報工学研究科  
生命情報工学研究系 教授 山西 芳裕

近年の生命医学では、ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム、フェノーム、インタラクトームなどの大規模オミックス情報が得られるようになった。同時に、膨大な数の化合物や薬物に関する化学構造情報や生理活性情報も蓄積されている。本講義では、機械学習(人工知能AIの基盤技術)を駆使して、多様なバイオビッグデータの融合解析から生命科学や医療・創薬に繋げるアプローチについて紹介する。

### 10.24 [水] X線結晶解析・NMR・電子顕微鏡・AFMを統合した相関構造解析

九州大学 生体防御医学研究所 教授 神田 大輔

タンパク質分子の原子レベルの立体構造に基づき、酵素などの機能発現のメカニズムが説明でき、タンパク質分子の立体構造の時間変化、すなわち動的な情報を得ることで理解を深めることができる。さらにX線結晶解析、NMR(核磁気共鳴法)、電子顕微鏡、AFM(原子間力顕微鏡)などの複数の方法を組み合わせることで、新しい知見を得ることができる。それぞれの解析手法と複数の解析手法を統合した相関構造解析について具体例を挙げながら説明する。

### 10.31 [水] 二次代謝物のデータサイエンス

奈良先端科学技術大学院大学  
先端科学技術研究科 教授 金谷 重彦

2009年、Jim Grayが「第4のパラダイム: データ集約型の科学的発見」を提唱した。第1から第3のパラダイムとは、実験を通じた仮説検証、法則を定量的に表現する方法、計算機シミュレーションである。データサイエンスとは、このような方法論を包括し、科学の分野間を横断し、現象を解明する。さらにはこれらの知見をもとに、政策決定などの意思決定にまでつなぐ方法論といえる。本講義では、二次代謝物におけるデータサイエンスについての研究の紹介と今後の課題について考察する。

[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)、田中 成典(神戸大学大学院システム情報学研究所 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)、鶴田 宏樹(神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/工学研究科 准教授)、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\\_science5/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science5/)

### 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

## 第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

### 11.7 [水] 生命系の分子動力学シミュレーション

横浜市立大学大学院生命医科学研究所 教授 池口 浩徳

生体分子モーターなど、多くの生体分子は動くことで機能している。そのような生体分子の動きについて、コンピュータによって研究する方法が分子動力学シミュレーションである。本講義では、分子動力学シミュレーションの基礎から、タンパク質や核酸などの生体分子に適用した事例まで解説する。

### 11.14 [水] フラグメント分子軌道法に基づく構造生命科学

星薬科大学薬学部 准教授 福澤 薫

フラグメント分子軌道(FMO)法は、生体高分子の全電子計算を高速かつ高精度に実行することができる量子化学計算手法である。X線結晶構造の理論的な解釈やそれに基づいた高精度な構造ベース創薬に活用できるため、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期待されている。講義では、FMO法に基づく最新の取り組みについて、スーパーコンピュータを活用したFMO計算結果のデータベースなども交えて紹介する。

### 11.21 [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

大阪大学大学院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。

### 11.28 [水] 分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬支援

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概説する。

### 12.5 [水] QM/MM法の概略と応用

茨城大学大学院理工学研究科 教授 森 聖治

本講義では、2013年ノーベル化学賞受賞対象であり、反応の重要な部分に精度の高いQM法、その他の部分に計算コストの安いMM法を組み合わせたハイブリッド法である、QM/MM法の概略を説明し、化学反応系や酵素反応に対する応用について説明する。

## 第3編 健康科学・医療・創薬への応用

### 12.12 [水] 医薬品業界におけるデータサイエンティスト

塩野製薬株式会社 デジタルインテリジェンス部  
グループ長 都地 昭夫  
塩野製薬株式会社 解析センター グループ長 北西 由武

データサイエンティストはデータを活用するために、関連データベースや解析手法に習熟し、ビジネスの観点も加味して、仮説立案と検証を提案し、サイクルを回していく役割である。本講義では、周辺技術であるIoT、ビッグデータ活用や人工知能、シミュレーションに関する技術などの事例を交えながら医薬品業界におけるデータサイエンティストのあり方を解説する。

### 12.19 [水] さまざまな生命科学データの接続で見える新たな知見

お茶の水女子大学 シミュレーション科学・生命情報学教育研究センター  
教授/早稲田大学先端理工学部生命医科学科 教授 由良 敏

生命科学における測定技術の進展は、膨大な生命科学データの蓄積をもたらした。これらのデータを利用して、新規の関係や仮説を生み出すためには、研究者の発想を支援するツールが必要である。そこで、生命科学の新たな知見(仮説)をデータに基づいて見いだすことを実現できるプラットフォームの構築に挑戦している。簡単なキーワードを入力することで、異なるデータベースを同時検索し、それらデータの間を見いだすことができることをめざしている。

### 1.9 [水] シミュレーションとAIの融合による創薬

理化学研究所 生命機能科学研究センター  
制御分子設計研究チーム チームリーダー 本間 光貴

近年の創薬において、インフォマティクスやシミュレーションを利用したインシリコスクリーニングは無くてはならないものとなっている。本講義では、インフォマティクスやシミュレーションの基本的な理論、創薬現場でのメリット・デメリット、最近の動向などについて事例を交えながら紹介する。また、最先端の研究として、機械学習(人工知能)的な方法や量子化学計算(FMO法)の応用などについても触れる。最後に、最近のライフインテリジェンスコンソーシアム(LINIC)における創薬AI開発の取り組みの現状について紹介する。

### 1.16 [水] ビッグデータを活用した健康科学への挑戦

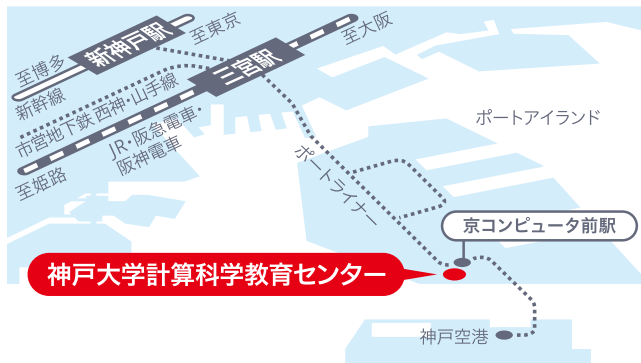
医薬基盤・健康・栄養研究所  
ワクチンリアルプロジェクト&腸内環境システムプロジェクト  
プロジェクトリーダー 國澤 純

近年、腸内細菌や食品が健康に与える影響が注目されている。これらの腸内環境は個人差が大きく、また生活習慣によっても変動する。本講義では私たちが行っているコホート研究から得られた「食事などの生活習慣-腸内細菌-生体内代謝物-健康に関する生体内因子-身体状態」に関するビッグデータを活用した研究を中心に、次世代の健康科学研究に向けた挑戦を紹介したい。

### 1.23 [水] 脳情報の可視化とその応用

情報通信機構  
脳情報通信融合研究センター 研究員 西田 知史

ヒトの知性は脳内の情報表現により形成されている。近年の計算神経科学の発展により、視覚・聴覚・意味などの脳内情報表現を、fMRIなどによる計測脳活動から可視化することが可能になってきている。本講義では、そのような脳内情報の可視化における最新の研究成果を紹介するとともに、成果の応用として脳情報と人工知能の融合による新技術とその産業応用の可能性について解説する。



## 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」

### 概要

昨年度に引き続き、2019年度遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎V」の特別編として「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。

講義は、生命科学における最新の人工知能研究の動向について、実習はCheminformaticsとBioinformaticsを題材とした簡単なPythonプログラムの実行と解説を行った。

### 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

### 主催

神戸大学計算科学教育センター

### 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。  
(実習は配信無し)

### 担当講師

- ・石田貴士 (東京工業大学)
- ・渡邊博文 (神戸大学計算科学教育センター)
- ・TA: 鈴木洋介 (神戸大学計算科学教育センター)
- ・TA: 八木学 (理化学研究所 計算科学研究センター)

### 講義内容

#### 【講義】「生命科学分野における深層学習技術」 講師：石田貴士 (東京工業大学)

複雑で原理の解明が困難な現象を扱う生命科学の分野では、タンパク質の2次構造予測を筆頭に機械学習などの人工知能技術が利用されてきた。近年、深層学習の登場により画像認識や自然言語処理などで劇的な改善が得られているが、生命科学の分野でも深層学習は大きな威力を発揮しつつある。本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ついて解説を行う。

#### 【実習】「Python+TensorFlowによる実習 (生命科学の分野での機械学習)」

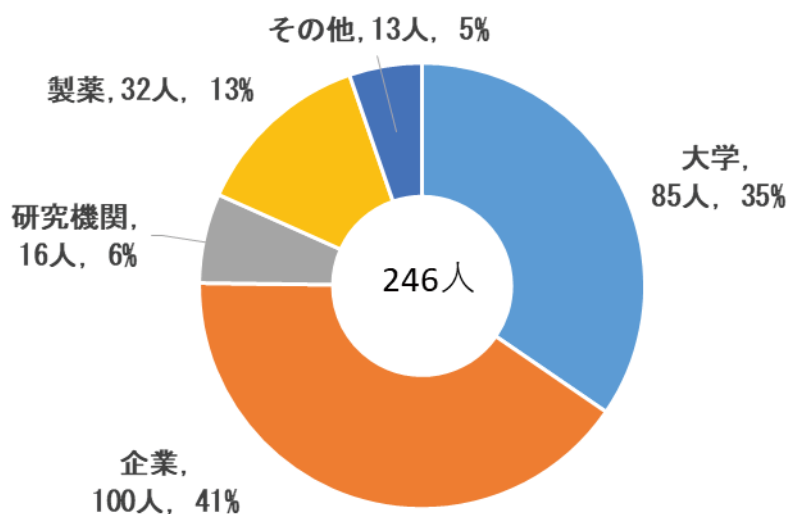
講師：渡邊 博文 (神戸大学)、TA：鈴木 洋介 (神戸大学)、八木 学 (理化学研究所)

AI分野でよく使われるPythonとTensorFlowを使って、ニューラルネットワークによる予測モデルの作成を学ぶ。ケムインフォマティクス分野からは、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、バイオインフォマティクス分野からはペプチドの2次構造予測の初歩的な問題に取り組む。データの前処理から、学習モデルの作成、モデルの評価までを取り扱う。生命科学分野での機械学習の初歩を学びたい方を対象とする。

### 受講登録者状況等

246人（会場参加19人を含む）（最終）



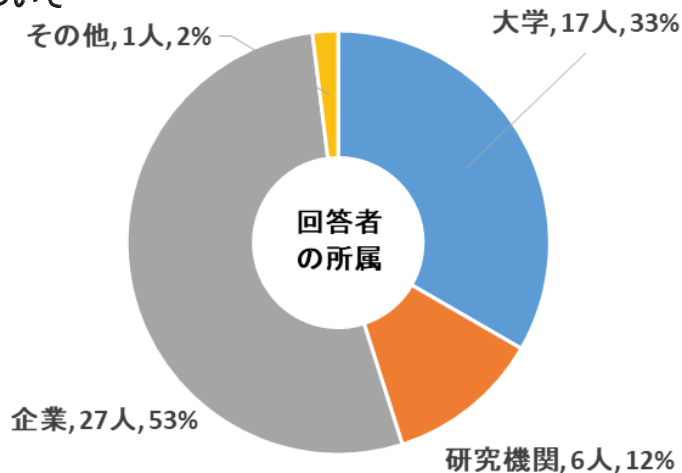
### 受講者アンケート（チュートリアル終了後）

#### 【調査概要】

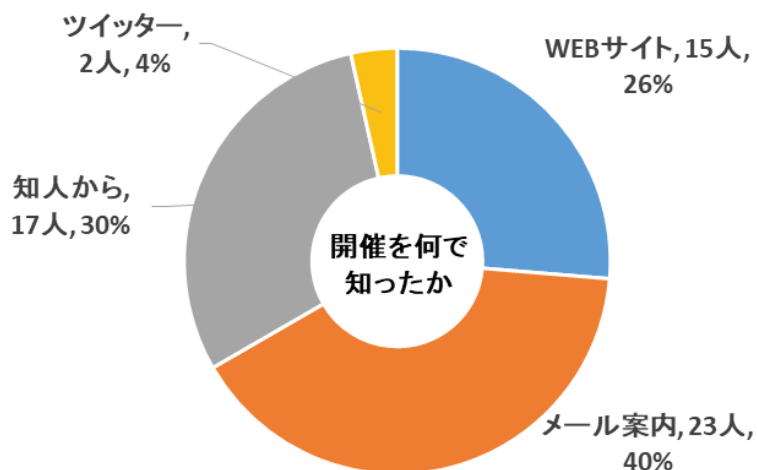
1. 対象 「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」の受講登録者
2. 標本数 246人（2018年9月25日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査期間 2018年9月28日（水）～2018年10月11日（木）
5. 回収数 52人（会場19人、WEB33人）
6. 回収率 約21.1%

【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. 開催を何で知りましたか



### 3. チュートリアル感想

#### <講義>

- ・最新の情報で面白かったです。
- ・専門外だったので難しかったのですが、非常に勉強になりました。
- ・知識なしでも分かる部分が多かった。知りたかった現在の技術が分かりやすく聞け、大変満足しました。
- ・機械学習はほとんど初心者なので、内容としては一部難しいところもありましたが、最近の動向も合わせての内容だったので、大変興味深い講義でした。
- ・医薬開発の統計解析に対しての利活用について聞いてみたい。
- ・これを機会に勉強を始めたい！



- ・ 最近の動向についてご紹介いただけたので自分が使うツールがどのような状況か理解出来ました。ありがとうございました。最後の方、少し時間が足りず残念でした。もっとお話し聞きたかったです。

#### <実習>

- ・ Deep learning の基礎と仕組みが分かった。
- ・ 画像処理を扱ってほしい。
- ・ 繰り返し説明いただき、実習できたため、よく理解でき身についた。何より深層学習を行える環境を自分のPCに準備できたことが大変助かりました。
- ・ もう少しアルゴリズムやコードの解説をしてほしかった(全体的に時間が足りなかった)。しかし、Deep learning の入門に触れることが出来て良かった。
- ・ ディープラーニングの入り口としては十分に満足しました。
- ・ これまでRを使っていてpythonでやることにすごくハードルを感じていて参加しました。今回すごく丁寧に説明くださり、また多数の質問に答えてくださり勉強になりました。

## 概要

大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会 (AXIES2018) (2018/11/19-11/21 札幌コンベンションセンター) 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 2017 年度報告」というタイトルで講演し、本講義のインターネット配信環境構築、その実施状況、課題等について報告した。

## 大会について

2018 年度の年次大会は 1100 名のご参加と、62 団体 (78 ブース) の出展を得て、開催された。

[開催日時] 2018 年 11 月 19 日 (月) ~11 月 21 日 (水)

[会場] 札幌コンベンションセンター (札幌市白石区東札幌 6 条 1 丁目 1-1 )

[主催] 一般社団法人 大学 ICT 推進協議会

[後援] 文部科学省、札幌市、札幌市教育委員会、情報処理学会北海道支部

[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 2017 年度報告

発表者: 鈴木洋介 (神戸大学計算科学教育センター)

## 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

鈴木洋介<sup>1)</sup>, 渡邊博文<sup>1)</sup>, 八木学<sup>2)</sup>, 石野麻由子<sup>1)</sup>, 土井陽子<sup>3)</sup>, 江口至洋<sup>4)</sup>,  
田中成典<sup>1)</sup>, 鶴田宏樹<sup>4)</sup>, 白井剛<sup>5)</sup>, 森一郎<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) 理化学研究所計算科学研究センター
- 3) 理化学研究所生命機能科学研究センター
- 4) 神戸大学学術・産業イノベーション創造本部
- 5) 長浜バイオ大学バイオサイエンス学部
- 6) 神戸大学科学技術イノベーション研究科

suzuki@ferret.kobe-u.ac.jp

## Report of 2017 fiscal year; Interactive Distance Learning “Introduction to Computational Life Science” Broadcasted from Kobe

Yosuke Suzuki<sup>1)</sup>, Hirofumi Watanabe<sup>1)</sup>, Manabu Yagi<sup>2)</sup>, Mayuko Ishino<sup>1)</sup>, Yoko Doi<sup>3)</sup>,  
Yukihiro Eguchi<sup>4)</sup>, Shigenori Tanaka<sup>1)</sup>, Hiroki Tsuruta<sup>4)</sup>, Tsuyoshi Shirai<sup>5)</sup>,  
Ichiro Mori<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 Computational Science, RIKEN
- 3) Center for Biosystems Dynamics Research, RIKEN
- 4) Office for Academic and Industrial Innovation, Kobe University
- 5) Department of Bioscience, Nagahama Institute of Bio-Science and Technology
- 6) Graduate School of Science, Technology and Innovation, Kobe University

### 概要

計算生命科学は、生命の理解に向けて、近年急速に進展している計算科学と医農工学分野が融合した学際的研究領域である。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おり、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、昨年度は 600 名の受講登録を受け付けた。本稿では、2017 年度に実施した「計算生命科学の基礎 IV」と、最近注目されている AI や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ディープラーニングチュートリアル開催結果について報告する。年々受講者が増え続けており、アンケートでも高評価を得ている。

### 1 はじめに

ゲノム情報、RNA 配列情報、タンパク質構造などのデータベースの整備や、スーパーコンピュータによる計算機シミュレーション技術の発達により、「計算生命科学」の研究分野は大きな発展を遂げている。この研究分野は、創薬や有用物質の生産などの様々な応用が期待されるため、大学や研究機関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、最先端の研究の現状を網羅的に習得する場や、研究分野全体を網羅的に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、学術・産業イノベーション創造本部、理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム[1]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 4 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[3]。

大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会では、2016 年度までの過去 3 年の取り組みについて、システム面や受講状況などについて報告した[4]。本稿では 2017 年度に実施した「計算生命科学の基礎Ⅳ」と、最近注目を浴びているディープラーニングや機械学習に焦点を当てた特別編「ディープラーニングチュートリアル」について報告する。

なお 5 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、さらに脳科学などの新しいテーマを加え、10 月より遠隔講義を開始する予定である[5]。

## 2 講義概要

本遠隔インタラクティブ講義は、毎週同じ曜日、同じ時間にインターネットを使った配信により、計 15 回の講義を提供する。配信環境としては Cisco 社の WebEx Event Center を用いている。これは主催側 PC から講義の様態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などを受講者の 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。同時接続の上限は 500 とされており、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、質問などのメッセージを主催者側 PC に送ることも可能であり、この機能を利用して講義に対する質問などを受け付けている。

さらに一部の講義については、その様態をアーカイブ化した映像を公開している[6]。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。申し込み受付は Web のフォームにより行っている。

## 3 2017 年度「計算生命科学の基礎Ⅳ」

4 年目となる 2017 年度は、2017 年 10 月から 2018 年 1 月にかけて 15 回実施した。受講登録者は 609 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)。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「ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎」、「構造生命科学のための分子シミュレーション」、「計算生命科学の医療・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講義をいくつか取り入れた。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。

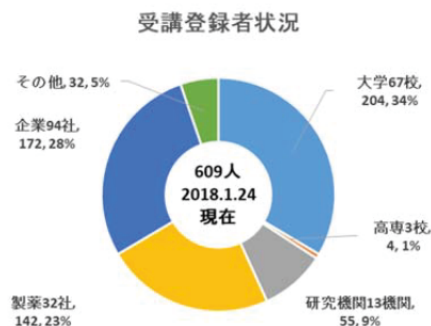


図 1 2017 年度「計算生命科学の基礎Ⅳ」受講登録者の所属分布

受講登録者の所属は図 1 のとおりである。企業関係者が半分近くを占めており、この傾向は昨年度までと同様である。企業に向けた広報も大きな要因であると考えている。

次に、大学関係者の全国分布を図で示す(図 2)。

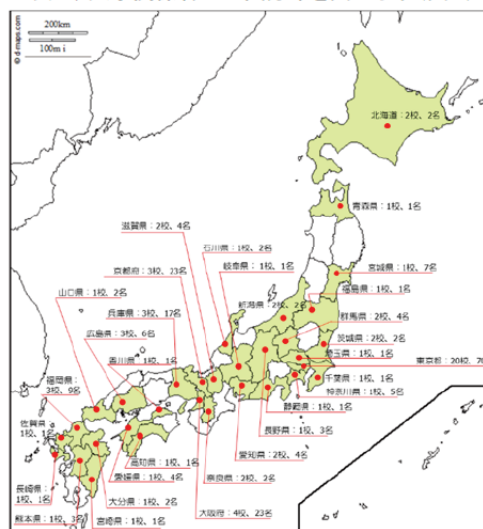


図 2 2017 年度「計算生命科学の基礎Ⅳ」の大学所属の受講登録者の全国的な広がり  
([https://d-maps.com/carte.php?num\\_car=24851&lang=ja](https://d-maps.com/carte.php?num_car=24851&lang=ja) をもとに作成)

全国の 34 都道府県の 67 大学から 204 名の受講者の登録があった。

なお、昨年度の最大同時接続数は約260であったが、WebEx Event Centerの上限は500であり、接続数にはまだ余裕がある。

次に受講者の受講後の評価について述べる。アンケートを行い、受講登録者609名中150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」、6を「とても良かった」として1から6の6段階で評価してもらった。6の「とても良かった」が約1/4であった。さらに、3分の2以上の方が5または6の評価であり、約9割の方が4以上の評価となっており、大変高い評価を得ている(図3)。

具体的な意見としては、「どこからでも受講できる」、「役に立つ」、「質量ともに優れている」といった評価する意見が寄せられた。また、「遠隔講義をもっとやってほしい」、「遠隔講義を自分の大学でもやりたい」といった声も聞かれた。

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20%程度となっている。

一方で、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。また要望として、講義録画の公開の拡大を求める声もみられた。

11. 全体を通して受講していかがでしたか。  
150名の回答

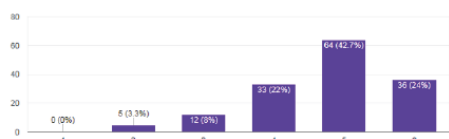


図3 2017年度「計算生命科学IV」遠隔講義全体の評価(アンケート結果):6を最高、1を最低とした6段階評価の結果。

## 5 特別編「ディープラーニングチュートリアル」

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も聞かれた。

こうした要望に応えるため、通常の配信講義に先立ち2017年9月19日、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2コマ講義(90分ずつ)と実習(2時間)を、特別編として実施した。

1コマ目の講義では機械学習の全般的な説明、最近のディープラーニングの成果、生命科学分野への応用などが話され、バランスの取れた良い講義であった。終了後のアンケートでも非常に高い評価を得たが、バランスを重視したため生命科学分野での応用について説明が少なくなってしまう問題もあった。2コマ目の講義では、ディープラーニングの原理をテーマとし、どのように計算が高速に行われているかということについての非常にレベルの高い講義であった。しかしながら、参加者のレベルや興味とは必ずしも一致せず、難しすぎるという意見が多くみられた。

実習は、画像認識の分野において代表的なデータセットの一つであるMNISTを取り上げ、フィードフォワード型ニューラルネットワークにより、文字認識を行うという課題に取り組んでもらった。機械学習分野で最もよく使われているプログラミング言語であるPythonと、Google製でディープラーニングなどを扱う際に最も有力なフレームワークの一つであるTensorFlowを取り上げた。また、実行結果を、すぐに見ることができるJupyter notebookを使用した。終了後のアンケートでは、おおむね良好な回答を得た。その一方で、取り上げた課題(MNIST)が生命科学分野からは遠いこと、データを準備する部分の説明が不十分であることが課題として挙げられた。

受講の募集は通常とは別で行っており、ポスターやチラシによる案内はなく、メーグリストや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関心は高く、講義は276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12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。

「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル」  
所属別 申込者数

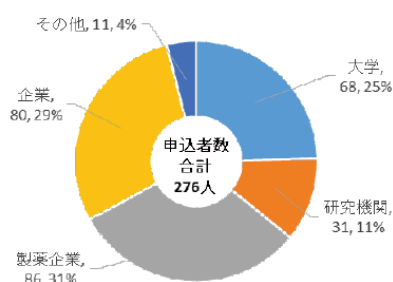


図4 2017年度「特別編」講義受講者の所属分布

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4)。

特別編は注目が高く、講義の評判は良好であったが、難しすぎたという意見も見られた。また、実習は初級レベルということはあらかじめ周知しており、レベル的な不満はなく肯定的な意見が多かった。

なお、実習の遠隔配信も検討中ではあるが、システム面や人的リソースの問題など、実施に至るまでには解決すべき課題は多い。

## 6 まとめ

本報告では、2017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IV」及び特別編「ディープラーニングチュートリアル」の実施状況についてまとめた。これまでの4年間分の講義及び特別編を合わせると延べ2000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。

2018年10月3日からは、計算生命科学の基礎Vの実施を予定している。(2018年8月31日現在の登録者414名、昨年度の同時期の登録者329名。)

本講義で対象とする分野は、現在も急速に発展し続けており、講義を継続的に配信したいと考えている。現在、予算、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り、継続的な運営のための資金確保に努めていく必要がある。

## 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] HPCI 戦略プログラム分野1 サイト  
<http://www.scls.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] 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.

- [5] 「計算生命科学の基礎V」受講申込サイト  
[http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance\\_learning/life\\_science5/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science5/)
- [6] 「計算生命科学の基礎IV」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\\_2017](http://www.r-ccs.riken.jp/jp/course/course-base_2017)







## コーディネーターコメント

---

単純な数式には還元できない生命現象を解析するためには、大量のデータ自体に語らせるデータサイエンスが実は一番適した方法ではないかと考えます。その思いも込めて、「計算生命科学の基礎Ⅴ」ではデータサイエンスというキーワードをタイトルにとり入れました。生物学のデータは塩基配列から分子構造まで多様であり、それらのデータが計算利用可能な形で、しかもビックデータと呼べる規模で蓄積し始めたのはつい最近のことです。すなわち、生命データサイエンスは始まったばかりであり、これから成果が得られる学問であると思います。2018年は過去最多の約750名の受講登録をいただき、無事講義をお届けできたと思いますが、この講義を受講して下さった方々が、その担い手になっていただければ幸いです。

白井 剛

(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)



この遠隔講義は「計算生命科学」の「基礎」と銘打ってはいますが、そもそも「計算生命科学」とは何か、さらに遡って、生命を記述するとはどういうことなのか、について既に確立された見解が共有されているわけではありません。生命系に対する実験計測やシミュレーション、データサイエンスの技術が近年急速に進化して、その最前線で活躍されている研究者の皆さんに「基礎」と思われる事項や最新の適用事例を紹介していただき、それを多数の方々に同時に聴いていただくことで、ある意味、話す側と聞く側が一体となって新たな研究領域を模索し、立ち上げていければと世話人一同考えています。そういった意味からも、受講者の皆様方からの真摯で率直なコメントを心よりお待ちしております。



田中 成典

(神戸大学大学院システム情報学研究科 教授)

今年度も引き続き「計算生命科学の基礎」の応用編（第3編）の担当をさせて頂きました。この研究領域は様々な分野・産業に応用可能性があり、5講師の講義だけではカバーしきれませんが、毎年出来るだけ異なる最新、重要なトピックを選んで講義をお願いする努力をしています。各分野の講師の方々との出会いに恵まれ、第3編を無事実施する事が出来たことを皆様に感謝いたします。人工知能、データサイエンス等の進歩が恩恵を受けるこの分野で、今後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、受講者の皆さん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。

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)



編集・発行



神戸大学計算科学教育センター

〒650-0047 神戸市中央区港島南町 7-1-48

(TEL) 078-599-6720 (FAX) 078-599-6711

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



2019年3月