

[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 バトンゾーン推進プログラム 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

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・ティーチャリング・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やティーチャリ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、神戸医療産業都市推進機構、NPO法人パイオグリッドセンター関西

▶プログラム詳細はこちら!

登録受付中

計算生命

検索



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構造・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、リビ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。

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

関嶋 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-2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))

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、今後もそれはただち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 人間機械協同研究チーム 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、それを表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)

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いて紹介する。



▶ **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 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 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)

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/

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