



[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

▶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 高田 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 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。

[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 パ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)、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**

**11.6 [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関連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体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体の自由エネルギー解析を概説する。統計力学と分子シミュレーションの基礎から出発して、溶媒和理論の構成について述べ、タンパク質構造に対する共溶媒効果、タンパク質複合体の安定性、および、タンパク質-脂質膜相互作用の分子レベル解析に進む。

**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所 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

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。

**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、今後の活用が期待されている。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 パ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。

**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 敬

「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~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。

