

計算生命科学の基礎VII

第2編 「構造生命科学のための 分子シミュレーション」

田中成典（神戸大学システム情報学研究科）

スケジュール

- ▶ 11月11日：関嶋政和（東京工業大学）「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」
- ▶ 11月18日：Daron Standley（大阪大学）「Analysis of antibody-antigen interactions from sequence data」
- ▶ 11月25日：広川貴次（産業技術総合研究所）「分子シミュレーションを活用したインシリコ創薬支援」
- ▶ 12月2日：高田彰二（京都大学）「分子シミュレーションと計測データの融合」

構造生物学と計算科学の連携・融合

- ▶ 分子構造をベースとした分子動力学シミュレーション
- ▶ 生体分子間の相互作用やドッキング構造の解析
- ▶ 電子状態計算や粗視化シミュレーションとの接続
- ▶ データサイエンス、インフォマティクス、機械学習、AI技術の活用
- ▶ 創薬応用（特に新型コロナウイルス関係）