



[遠隔インタラクティブ講義]

計算生命科学の基礎10

融合するAI、データサイエンス、生命科学、そして次の10年をみすえて

オンライン
受講

聴講無料
事前登録制

2023
10.4 WED → 2024
1.31 WED

[全15回] 毎週水曜日 17:00-18:30

※ただし、11/15(水)のみ11/17(金)に開催

受講方法 **Zoomオンライン受講**

企画協力：
日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

本年この遠隔講義「計算生命科学の基礎」は10年目となり一区切りの時期を迎えました。この間、機械学習(AI)技術の劇的な発展により、生命科学分野の様相は一変しました。研究自体をAIが行う未来予測も散見されるようになりましたが、この分野の包括するゲノムから生態までの多様で膨大なデータを、物理・化学・生物学・数学・データサイエンスなどの異なるバックグラウンドの知識を使って解析するには、未だ力不足と思われます。したがって、AIと計算生命科学の知識を駆使して新しい知見を生み出す人材の必要性は、今後の10年でさらに高くなると予測されます。この遠隔講義では、未来の医療や創薬の基盤となる生命科学のデータサイエンスやシミュレーション技術の基礎から応用までを、第一線で活躍されている先生にご講義頂くことで、受講者に計算生命科学に興味を持って頂くきっかけとなり、この学際的研究分野で活躍する人材育成に寄与することを目指しています。本講義は、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います。

[担当講師]

中井 謙太	東京大学医科学研究所 教授
藤 博幸	関西学院大学生命環境学部生物科学科 教授
鎌田 真由美	京都大学 大学院医学研究科 准教授
廣明 秀一	名古屋大学大学院創薬科学研究科 構造分子薬理学分野 教授
河野 隆志	国立がん研究センター がんゲノム情報管理センター (C-CAT) センター長
奥村 久士	自然科学研究機構 生命創成探究センター 准教授
広川 貴次	筑波大学 医学医療系 教授
黒田 真也	東京大学大学院理学系研究科 生物科学専攻 教授
古賀 信康	大阪大学蛋白質研究所 教授
鬼頭 宏任	近畿大学理工学部エネルギー物質学科 准教授
黒田 知宏	京都大学 医学部附属病院 医療情報企画部 教授
山西 芳裕	名古屋大学大学院情報学研究科 複雑系科学専攻 生命情報論講座 教授
樽林 陽一	東京大学大学院薬学系研究科附属創薬機構 構造展開ユニット 客員教授・構造展開ユニット長
岸本 泰士郎	慶應義塾大学医学部 特任教授
川人 光男	株式会社国際電気通信基礎技術研究所 脳情報通信総合研究所 所長

計算生命科学の基礎10 スケジュール

第1編 生命科学のための データサイエンスの基礎

10.4 [水] ゲノムインフォマティクスの基礎 初學者向け 中井 謙太(東京大学医科学研究所 教授)

生命科学と情報科学の融合分野としてのバイオインフォマティクスが生まれたのは20世紀の終わりにかけてのこと、いわゆるヒトゲノム計画の進展に伴うものだった。それから、数十年が過ぎて、我々の生命情報やゲノムに関する知識やデータは飛躍的に増加している。本講義ではこれらの状況に即応した、新しいバイオインフォマティクスやゲノムインフォマティクスの基礎として重要と思われる知見を、限られた時間の中ではないか紹介したい。

10.11 [水] タンパク質の機能の進化とその情報解析 初學者向け 藤 博幸(関西学院大学生命環境学部生物科学科 教授)

遺伝子重複は新規機能を持ったタンパク質の形成のための主要な進化機構である。本講義では、遺伝子重複のDDCモデルを紹介した後、新規機能獲得に関するサイトの予測手法とその応用、またネットワーク解析によるduplicabilityの解析など、遺伝子重複に関連する情報解析について話す。

10.18 [水] 創薬のための機械学習 鎌田 真由美(京都大学 大学院医学研究科 准教授)

膨大な数の文献や健康・医療データ、大規模なマルチオミクスデータなど、創薬・医療に関する知見やデータが蓄積されている。それらを活用し、標的分子の探索や毒性の予測など、創薬における様々なプロセスにおいて人工知能(Artificial Intelligence, AI)の活用が進められている。本講義では、人工知能の基礎と様々な機械学習モデルについて学ぶとともに、創薬における応用例について紹介する。

10.25 [水] 天然変性領域を標的とした論理的創薬 廣明 秀一(名古屋大学大学院創薬科学研究科 構造分子薬理学分野 教授)

ゲノム解読が進化するにつれ、ヒトゲノムや多くの病原体(細菌・ウイルス)の中から、コンパクトな立体構造を持たないアミノ酸配列をコードした遺伝子・領域が多数発見された。天然変性領域(intrinsically disordered region: IDR)と呼ばれるそれは、しかし、アミロイド形成や細胞内液体相分離と関わりが深く、創薬標的としても注目を集めつつある。本講義ではIDR解析に強みがある溶液NMR法の基礎も含め、「鍵と鍵穴」スキームから外れた標的に対する論理的創薬の可能性について概観する。

11.1 [水] 保険診療で行われるがん遺伝子パネル検査の ビッグデータの利活用 河野 隆志(国立がん研究センター がんゲノム情報管理センター (C-CAT) センター長)

5万例以上の進行がんがんの患者さんが保険診療で遺伝子パネル検査を受検され、同意のもと遺伝子変化と診療情報が集積されている。現在、50以上のグループ/施設が情報利活用審査会の承認のもと、このリアルワールド・ビッグデータの利活用を行っており、その状況や今後への期待を概説する。

第2編 構造生命科学のための 分子シミュレーション

11.8 [水] 生体分子動力学シミュレーションの 基礎と応用 初學者向け 奥村 久士(自然科学研究機構 生命創成探究センター 准教授)

生体系の分子動力学シミュレーションを行うために必要な基礎知識とその応用について講義する。具体的には原子の時間発展方法、温度または圧力の制御による各種統計アンサンブルの生成方法、構造サンプリングを効率的に行う手法である拡張アンサンブル法などを講義する。これらの手法の応用例として、我々のグループで行った病気に関連するタンパク質の分子動力学シミュレーション研究についても紹介する。

11.17 [金] インシリコ創薬の基礎と応用 広川 貴次(筑波大学 医学医療系 教授)

インシリコ創薬の代表的なアプローチであるLigand-based drug design (LBDD)およびStructure-based drug design (SBDD)について、基本的な内容及び、それぞれの長所や創薬支援に活用する際のポイントについて概説する。さらに応用例についても国内外の先行研究をいくつか紹介したい。

11.22 [水] 代謝システムのトランスオミクス解析 黒田 真也(東京大学大学院理学系研究科 生物科学専攻 教授)

生命活動は、ゲノム・エピゲノム・トランスクリプトーム・プロテオーム・メタボロームの各階層を介した複数のオミクス階層が密接に連動したトランスオミクスネットワークにより制御されている。本講義では、代謝システムにおけるトランスオミクス解析について述べる。また、トランスオミクスにタンパク質の構造を加えたstructureomeについて試みも簡単に紹介する。

11.29 [水] タンパク質人工設計の基礎 古賀 健康(大阪大学蛋白質研究所 教授)

近年、様々なタンパク質が合理設計されている。本講座では、タンパク質デザインソフトウェアRosettaを中心としながら、タンパク質の合理的な構造および機能設計について、その現状と今後の展望について解説する。

12.6 [水] 光合成系の理論研究と分子シミュレーション 鬼頭 宏任(近畿大学理工学部エネルギー物質学科 准教授)

光合成では、その初期過程において、励起エネルギー移動反応や電子移動反応が生体環境下で巧みに制御され、最終的に非常に高いエネルギー変換効率が実現されている。この講義では、光合成蛋白質の構造情報や(定常/高速時間分解)分光実験情報をもとに、分子シミュレーションを用いて光合成初期反応過程のメカニズムを理解するための理論研究手法について解説する。また関連する量子生命科学の研究についても紹介する。

第3編 未来をみすえた 医療・創薬への応用

12.13 [水] 情報技術が変える医療・医学の未来の姿 黒田 知宏(京都大学 医学部附属病院 医療情報企画部 教授)

電子カルテ解禁から早四半世紀、改めて述べるまでもなく、情報革命は確実に医療や医学を変えつつある。Dog Yearで進む情報技術の10年後を予想することは極めて難しいが、情報技術とは何なのかの基礎に戻って学び、その知識に基づいて情報技術が医療の何をどう変えていくと想像されるのかを展望する。

1.10 [水] AI・ビッグデータ時代の創薬科学 山西 芳裕(名古屋大学大学院情報学研究科 複雑系科学専攻 生命情報論講座 教授)

我々のグループでは、疾患に関するマルチオミクス情報・臨床情報、化合物に関する化学構造・遺伝子発現・標的分子情報などの医療ビッグデータを融合解析し、創薬や医療における様々な課題を解決するための機械学習アルゴリズムの開発を行っている。当日は、創薬標的探索、ネットワーク創薬、シナジー創薬学、細胞直接変換、医薬品分子構造設計などへの応用例を紹介する。

1.17 [水] 「データ×AI」で挑む包摂的コミュニティを 支える社会技術の開発 博林 陽一(東京大学大学院薬学系研究科附属創薬機構 構造展開ユニット 客員教授・構造展開ユニット長)

自治体が保有する健康・医療に関わる住民のビッグデータは悉皆性が高く、精緻なデータであるが、殆どが要配慮個人情報に分類されるものである。そのため、個人情報保護法による規制の対象となっており利活用が進んでいないのが現状である。今回の講義では、自治体が保有する医療ビッグデータと最先端の「説明可能な人工知能」を活用した「自リスク個別予測モデル」等の包摂的な地域コミュニティを支える社会技術の開発について我々の研究を中心に詳説する。

1.24 [水] デジタル技術による精神医学の 今後の展望と課題 岸本 泰士郎(慶應義塾大学医学部 特任教授)

精神疾患における症状の定量化の難しさは、診断の遅れや不一致につながり、治療評価をわかりにくくしている。演者らは、IoTデバイスや人工知能技術を用いることで、このような問題を解消できないかと考え、複数の医療機器開発に取り組んできた。例えば、リストバンド型ウェアラブルデバイスを用いたうつ病スクリーニング機器や、自然言語処理を用いた認知症スクリーニングを行う技術などである。講義では、これらの新規医療技術開発を例としてあげながら、今後のIoTデバイスや機械学習を用いた医療機器開発の展望やその課題について議論する。

1.31 [水] AIを利用した精神疾患の診断、治療、創薬支援 川人 光男(株式会社国際電気通信基礎技術研究所 脳情報通信総合研究所 所長)

人工知能技術、ブレインマシンインタフェースを含むブレインテックは、現代社会のデジタル化を急激に進め、社会の構造を変革している。コロナ禍と相まって、このような急激な社会変化は、心の不安をかきたて、精神疾患や依存症が増えている。脳科学と人工知能で心の不安に対処する戦略については、精神疾患診断と治療の現状と問題点をまず説明する。脳科学と人工知能を組み合わせて、客観的な診断のためのバイオマーカーが開発できること、また薬物に頼らない新しい治療法について説明する。

[コーディネーター] 伊藤 眞里(医薬基盤・健康・栄養研究所 AI健康・医療研究センター上席研究員)、河野 秀俊(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 プロジェクトディレクター)、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学研究科教授)、鶴田 宏樹(神戸大学バリエーションスクール 准教授)、間島 慶(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命情報科学チーム研究員)、森 義治(神戸大学大学院システム情報学研究科 講師)、八幡 恵明(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命情報科学チーム チームリーダー)

参加申込

神戸大学計算科学教育研究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_science10/

受講方法

Zoomウェビナーを使ったオンライン受講となります。
※今年度より会場での開催はいたしません。

オンデマンド再放送

毎週水曜日17時に都合が合わない方は、講義翌日の木曜日夕方から翌週火曜日24時まで、オンデマンド再放送で受講いただけます。
詳細は本講義のホームページをご覧ください。

