



神戸大学大学院システム情報学研究科  
計算科学教育研究センター

[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：AI技術の融合、そして医療・創薬への応用まで

# 計算生命科学の基礎9

## 企画協力：CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

生命科学分野では、次々と新しい計測方法が開発され、ゲノム情報を始め、タンパク質の立体構造から脳の活動状態を表すfMRIなど膨大かつ様々なデータが生み出されています。そのビッグデータから有用な情報の抽出、モデル化、それらの統合的な理解には、コンピュータを用いたデータ処理は不可欠です。特に、機械学習に代表されるAIによるデータ駆動的なアプローチに大きな期待が寄せられています。生命科学におけるデータサイエンス、それが計算生命科学です。そのカバーする領域は非常に幅広く、物理、化学、生物学、数学、情報科学といった異なるバックグラウンドの知識が必要です。本講義では、未来の医療、創薬へつなが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について、第一線で活躍されている先生に基礎から応用までをご講演頂きます。そして、受講者に異分野間の接点や融合研究の面白さを感じて頂くことと同時に、この学際的な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、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います。

2022

10.5 WED

2023

2.1 WED

[全15回] 毎週水曜日 17:00-18:30

※ただし、11/23(水・祝)のみ、11/22(火)に開催

神戸大学統合研究拠点(計算科学教育研究センター) 208セミナー室より配信

## [担当講師]

門田 幸二	東京大学 大学院農学生命科学研究科 准教授
中川 草	東海大学 医学部 分子生命科学 准教授
森脇 由隆	東京大学 大学院農学生命科学研究科 応用生命工学専攻 助教
川端 猛	東北大学 大学院情報科学研究科 応用情報科学専攻 特任准教授
館野 賢	日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所 主席研究員
重田 育照	筑波大学 計算科学研究センター 教授
篠田 涉	岡山大学 異分野基礎科学研究所 教授
広川 貴次	筑波大学 医学医療系 教授
北尾 彰朗	東京工業大学 生命理工学院 教授
望月 敦史	京都大学 医生物学研究所 教授
梁川 雅弘	大阪大学 大学院医学系研究科 放射線統合医学講座 放射線医学 講師
田中 沙織	奈良先端科学技術大学院大学 先端科学研究科 情報科学領域 特任准教授
近藤 次郎	上智大学 理工学部 物質生命理工学科 准教授
玉田 嘉紀	弘前大学 健康未来イノベーションセンター 教授
渡邊 正峰	東京大学 大学院工学系研究科 システム創成学専攻 准教授

オンライン  
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「計算科学センター駅」を降りてすぐ

共 催：神戸大学大学院システム情報学研究科 計算科学教育研究センター、神戸大学バリュースクール、医薬基盤・健康・栄養研究所、京都大学大学院医学研究科ビッグデータ医学分野、計算科学振興財団、日本生物学的精神医学会、兵庫県立大学データ計算科学連携センター、一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム、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、公益財団法人神戸医療産業都市推進機構、NPO法人バイオグリッドセンター関西、日本薬学会

▶プログラム詳細はこちら!

登録受付中

計算生命

検索





# 計算生命科学の基礎9 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

### 10.5 [水] ゲノム・トランスクリプトーム解析

門田 幸二(東京大学大学院農学生命科学研究科 准教授)

ゲノムとは、生物を構成するすべての遺伝情報のことである。その実体はDNAであり、4種類の塩基の並びの違いによって、生物種の違いが規定されている。ゲノム解析とは、生物種間でゲノム上のどこがどのように違うのかや、どの領域がどのような機能を果たすのかなどを調べるものである。トランスクリプトーム解析とは、ゲノム上の機能領域の働き具合を調べるものである。本講義ではこれらのトピックについて基礎的な事柄を中心に述べる。

### 10.12 [水] ウイルスの進化ゲノム解析

中川 草(東海大学医学部 分子生命科学 准教授)

近年様々な環境からウイルスの発見が相次いでいる。これは次世代シーケンサーに代表される塩基解読技術の発展の影響が大きい。本講義ではそのような大規模塩基配列をもとに進んでいるウイルス学研究の現在について講義する。特に、2019年末に生じた新型コロナウイルスに関しては、そのゲノム解析に関する最新の知見を講義する。

### 10.19 [水] タンパク質の立体構造予測 -AlphaFold以前と以後-

森脇 由隆(東京大学大学院農学生命科学研究科 応用生命工学専攻 助教)

タンパク質はその立体構造と機能が密接に関連しているため、1958年のミオグロビンの結晶構造解析以降、実験および計算によってその構造情報を取得する研究が長く行われてきた。2021年7月に登場した構造予測ソフトウェアAlphaFoldが登場するまで、タンパク質立体構造についての計算生命科学がどのように発展してきたか、そしてこれ以後に何が訪れることになるかについて講義を行う。

### 10.26 [水] Webを用いた生体高分子の立体構造モデリング

川端 猛(東北大学大学院情報科学研究科 応用情報科学専攻 特任准教授)

生体高分子の立体構造のモデリング(予測法)は、既存の立体構造を陽に用いる鋳型ベースの方法と、鋳型を用いないデノボ法の二つのアプローチがある。本講義では、比較的少ない計算量で予測できる鋳型ベースのモデリング法を中心に解説する。鋳型ベースのアプローチは、鋳一本の単量体だけではなく、他の分子が結合した複合体の立体構造(タンパク質複合体、化合物・タンパク質複合体)のモデリングにも簡単に拡張でき、その有用性はAlphaFold2以後も変わっていない。本講義では、鋳型ベースのモデリング用のサーバHOMCOSを中心に紹介したあと、AlphaFold2による予測モデルを集めたAlphaFoldDBの活用法についても説明したい。

### 11.2 [木] AI 創薬:創薬における人工知能と機械学習の基礎および応用

舘野 賢(日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所 主席研究員)

創薬の様々な場面において近年、人工知能(AI)や機械学習(ML)の活用が急速に進んでいる。本講義ではそれらの基礎事項を中心に、理解と考え方のポイントを解説する。これらの研究においては、これまでの講義でも解説されたゲノム科学や分子モデリング、分子シミュレーション(古典・量子)などとの融合による計算解析技術の発展もまた著しい。そうした視点も交えて、広く創薬へのAIやMLの応用について実例を絞って紹介する。

## 第2編 構造生命科学のための理論・シミュレーション技術

### 11.9 [水] QM/MMによる酵素反応解析

初學者向け

重田 育照(筑波大学計算科学研究センター 教授)

タンパク質は極めて複雑な構造と精緻な機能をもつ高分子化合物であり、分子認識、情報伝達、酵素反応など、生体内でおこなわれる様々な生命現象の根幹をなす。立体構造と機能の間には大きな相関(構造-活性相関)があることが期待されていることから、これまでX線回折実験や核磁気共鳴法(NMR)などの実験的手法により、数多くのタンパク質の立体構造が明らかにされてきた。近年のスーパーコンピュータの発展、および解析手法の進展が相まって、生体内でおこなわれる化学反応解析の分野は格段の進歩を遂げている。本セミナーでは、生命現象を解析するためのQM/MM計算を解説すると共に、我々の研究室が行っている研究に関して最新の話題を提供する。

### 11.16 [水] 生体膜・脂質膜の分子シミュレーション

篠田 渉(岡山大学 異分野基礎科学研究科 教授)

脂質膜環境の分子シミュレーションの手法について解説する。膜系の設定に関する基本的な手法の説明後、低分子や薬物の膜透過性を評価する方法論について紹介する。後半では、より大きな膜構造変化を伴う現象の解明のため、定量性を持つ粗視化力場を使った計算による自己組織化・膜の大変形、膜融合、膜の相分離(ラフト)構造に関する議論を行う。時間が許せば、膜への抗菌剤作用に関する計算例も紹介する。

### 11.22 [火] 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。

### 11.30 [水] 分子シミュレーションで見るタンパク質や核酸の複合体形成と解離

初學者向け

北尾 彰朗(東京工業大学生命理工学院 教授)

生体内ではタンパク質・核酸や低分子などが出会って複合体を形成し、分子の機能を発揮する。また、形成されている複合体は解離して、その機能を変化させる。このような過程を原子解像度で直接観察することは難しいが、原子を最小単位としてモデル化して分子シミュレーションを行うことで、タンパク質や核酸が複合体形成と解離を行う様子を計算機上で観ることが可能になってきた。この講義では、分子シミュレーションによって明らかになってきた複合体形成と解離のメカニズムについて講義する。

### 12.7 [水] 生命システムの振る舞いをネットワークの形だけから決定する

初學者向け

望月 敦史(京都大学医学部 教授)

多数の生体分子が関わる複雑なネットワークのダイナミクスから、様々な生命機能が生まれることが分かってきた。生命システムのダイナミクスを理解する必要性が高まっている一方で、その複雑さが困難となっている。これに対し我々は、ネットワーク構造だけから力学的振る舞いの重要な側面が決定できることを発見し、構造理論として展開してきた。今回は、二つの構造理論と、それらを用いた実際の生命現象の解明について紹介する。

## 第3編 未来をみすえた医療・創薬への応用

### 12.14 [水] 胸部画像診断におけるAI:臨床応用、今後AIに期待すること

初學者向け

梁川 雅弘(大阪大学大学院医学系研究科 放射線統合医学講座 放射線医学 講師)

近年、AIの社会実装が推進される中、医療分野においてもAI技術の応用や開発はめざましい。本講義では、画像診断へのAI技術の応用、特に肺癌をはじめとする胸部領域の画像診断に焦点をあて、結節の検出や質的診断について、胸部単純X線写真やCTを用いた臨床研究、そして、実際の臨床現場でどのようにAIが活用されているかなどについて、文献の考察を加えながら紹介したい。AI技術の医療への普及は、放射線科医をはじめ医師の診断支援として役立つのみならず、診断能の向上や検査の自動化によるワークフローの改善にも貢献すると思われる。しかしながら、一方で、AIの解析過程のブラックボックス化を含め、その精度や限界についても十分知っておく必要がある。今後、我々は、AIに置き換えられていくのではなく、AIを理解し、いかにうまく活用していくかが鍵となる。

### 1.11 [水] ヒトの行動原理の理解のための数理的アプローチ

田中 沙織(奈良先端科学技術大学院大学 先端科学研究科 情報科学領域 特任准教授)

脳の複雑な機能の解明には、物質や回路の働きについての数理モデルを仮定し、それを実験的手法で検証する「計算論的神経科学」のアプローチが有効であることが広く浸透してきた。本講義では、異なる個人特性を持つ集団の行動及び脳活動実験によって、意思決定の数理モデルの構築を目指す試みについて紹介する。また、人を対象とした研究に特有の問題(異質性の高さ、非侵襲計測)をどう扱うか、世界的な流れでもある大規模脳・行動データ研究との連携からヒントを探る。

### 1.18 [水] 生命科学・創薬・ものづくりのための核酸構造生物学

近藤 次郎(上智大学 理工学部 物質生命理工学科 准教授)

DNAやRNAといった核酸は、生命科学の研究対象としてはもちろんのこと、創薬やものづくりへの応用も可能な魅力的な分子である。本講義では、核酸に特化したX線結晶解析の実際と、得られた立体構造情報の解釈、およびドラッグデザイン・分子デザインへの活用方法について、実例を交えて解説する。また、核酸の立体構造予測の現状についてもお話ししたい。

### 1.25 [水] スーパーコンピュータによる生命科学・健康医療超多項目データ解析

初學者向け

玉田 嘉紀(弘前大学 健康未来イノベーションセンター 教授)

RNA-Seqなどのオミクスデータや弘前大学COIに代表される健診ビッグデータなど、生命科学・健康医療における超多項目のデータ解析方法の一つとして、解析性が高いAI(人工知能)モデルであるベイジアンネットワーク(BN)を用いたデータ解析事例を紹介する。BNは計算負荷の高い解析方法であるためスーパーコンピュータを用いた独自実装による解決法や、モデル自体ではなくサンプルごと、あるいは個人ごとの解析を可能にする、発表者が考案した解析法も併せて解説する。

### 2.1 [水] 意識の科学 -或いはその副産物としての意識のアップロード-

渡邊 正峰(東京大学 大学院工学系研究科 システム創成学専攻 准教授)

意識を科学の俎上に載せるためには「意識の自然則」の導入が必要である。一方で、それを検証する上で、生体脳を用いることはできない。結果に干渉する要素を排除できないためだ。必然的に、人工意識の開発をとおしてアナリシス・バイ・シンセシスの意識の自然則を定めることになるが、今度は、人工意識をテストする方法が不可欠となる。本講義では「人工意識の脳半球接続テスト」を提案し、それが、意識のアップロードにつながることを示したい。

## ▶アーカイブサイト 公開中

過去の講義を視聴できます

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。

URL [http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance\\_learning/life\\_science9/](http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science9/)

受講方法  
Zoomでの遠隔受講が基本となります。さらに、神戸大学計算科学教育研究センターでの講義の場合には、会場での直接受講も可能となります。(詳細はホームページをご覧ください)

問合せ 神戸大学計算科学教育研究センター  
Eメール [ls-jimu@eccse.kobe-u.ac.jp](mailto:ls-jimu@eccse.kobe-u.ac.jp)

[コーディネーター] 伊藤 真里(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)、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科学研究科 教授)、鶴田 宏樹(神戸大学 バリュースクール 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 一郎(神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科 客員教授)、森 義治(神戸大学大学院システム情報科学研究科 講師)、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)

