

開催報告書

遠隔インタラクティブ講義

計算生命科学の基礎

2021年度・2022年度・2023年度



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

目次

はじめに	1
遠隔インタラクティブ講義について	2
2021 年度「計算生命科学の基礎 8」	3
アンケート結果について	11
2022 年度「計算生命科学の基礎 9」	19
アンケート結果について	28
2023 年度「計算生命科学の基礎 10」	35
アンケート結果について	43
コーディネーターコメント	50

はじめに

皆様のおかげをもちまして、2014 年度に開講された遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」も 10 年目を迎え、講師の先生方、受講者の皆様、担当コーディネーターや事務局の多大なるご協力により、例年通りオンライン講義をほぼ支障なく行うことができました。皆様には心より感謝申し上げます。

本シリーズは、シミュレーション科学やデータ科学などの手法を用いた生命科学の基礎的な内容や最先端の研究の現状を、第一線で活躍されている著名な研究者の方々に講義していただいております。また、生命科学に興味を持つ若手研究者の育成とともに産業界を含めて当該分野の裾野を広げることを目的とした連続講座です。2023 年度の講義登録者数は、大学や研究機関および企業の方々を含め 1600 名を超えました。また毎回の遠隔講義には 300 名前後の方がリアルタイムで受講していただきました。アカデミアのみならず企業の研究者を含め、このように多くの方々に本遠隔講義にご参加いただいていることに対して驚きを感じるとともに、受講者の皆様の修学意識の強さ、そして当該研究分野の注目度の高さに改めて驚嘆しています。また、これまでの講義内容のほとんどは理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)のご好意により、デジタルアーカイブ化され e-Learning 教材として公開されています。講義を受講できなかった方々にも、後日受講できる機会を提供していますので、是非ご利用ください。

この開催報告書は、2021 年度から 2023 年度までの 3 年間の実施活動内容と、聴講者のアンケートを取りまとめたものです。2014-2016 年度、2017,2018 年度および 2019,2020 年度の開催報告書も HP から入手できますので合わせてご覧いただけますと本シリーズで提供されたこれまでの講義の内容やテーマについてご理解していただけるかと思えます。当初は計算科学手法を軸とした生命科学の基礎的な内容が主体でしたが、昨今のビッグデータ解析や AI の普及に伴い、これらに関するデータ科学の観点も取り入れた講義も多くなってきていると感じていただけたと思います。

最後になりますが、本遠隔講義は、今回 10 年目という区切りの年を迎え、実施体制の変更などもあり、2023 年度で一旦、終了させていただきます。本遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」に対して、これまで 10 年の長きにわたり、ご支援、ご協力を頂きました多くの方々に心よりお礼申し上げます。名残惜しいところではありますが、これをおもちまして本遠隔講義を終了させていただきます。どうもありがとうございました。

令和 6 年 3 月

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
センター長 臼井 英之



遠隔インタラクティブ講義について

遠隔インタラクティブ講義は、WEB 会議システム（Zoom ウェビナー）を利用し、任意の場所にいる講師の講義を神戸の配信事務局を通じて各地の受講者にリアルタイムに配信する講義です。受講者はインターネット接続環境があれば、各自のパソコンやモバイル端末等でどこからでも無料で視聴ができ、講師への質問等もチャット機能でやりとりができます。

また、ライブでの受講に時間が合わない受講生には、講義翌日の夕方から一定の期間まで、「オンデマンド再放送」を開放し、好きな時間・場所で受講できるようにしております。

【講義日前日】

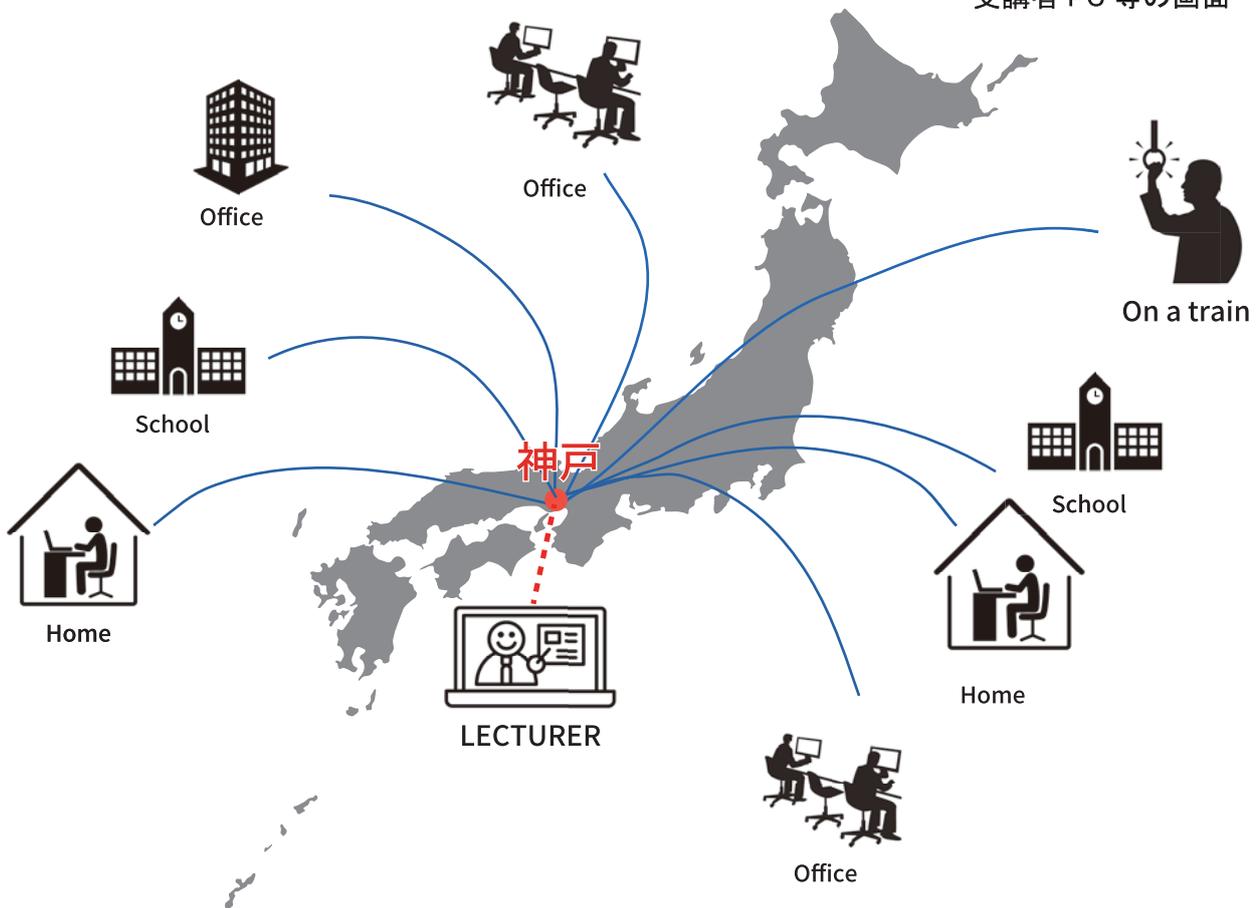
アクセス用 URL の記載された招待メールを全受講者に一斉送信します。

【講義日当日】

講義開始時間に URL にアクセスし、受講登録するだけで視聴ができます。受講者から音声でのアクセスは出来ませんが、チャット機能で質問や問合せが可能です。



受講者 PC 等の画面



配信事務局
神戸大学総合研究拠点
208 セミナー室
*2022 年度までの一部講義では、
講義会場としても利用



2021年度
計算生命科学の基礎 8

目的

生命のしくみを理解しようとする基礎生物学や人類の未来を担う健康・医療活動と連動しながら発展してきた生命科学の重要性は言うまでもないことでしょう。このような生命科学の発展にはゲノム情報や生体分子の立体構造などのビッグデータを扱うデータサイエンスが貢献しており、ディープラーニングに代表される機械学習や AI により未知の現象の予測をすることが可能となってきました。また様々なデータをシミュレーション技術により解析することによって、生体分子からマクロな生命現象までの多様な階層を定量的に理解することも行われてきています。このような計算生命科学は、お互いが融合することにより基本的な生物学のより進んだ理解から医学・薬学、農学や健康関連分野などのさらなる発展に寄与しています。本講義では以上のように発展してきた計算生命科学の基礎、そしてそれに基づいた現在から未来への医療・創薬に貢献できる知識を提供いたします。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、その基礎や現状、将来の展望等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、この学際的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。

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

共催、後援、協力

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、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科学分野、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、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

企画協力：日本バイオインフォマティクス学会、CBI 学会

運営体制

▼企画コーディネーター

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 量子生命科学研究所 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 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）

間島 慶（量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命情報科学グループ
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 特命教授）

森 義治（神戸大学大学院システム情報学研究科 講師）

八幡 憲明（量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命情報科学グループ
グループリーダー）

▼配信・運営担当

臼井 英之（神戸大学計算科学教育センター）

横川 三津夫（神戸大学計算科学教育センター）

近藤 洋隆（合同会社 VRAIDE／関西大学先端科学技術推進機構）

倉 仁美（神戸大学計算科学教育センター）

池条 真（神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻）

開催日程

2021年10月6日～2022年2月2日 毎週水曜日、全15回 17:00-18:30

講義会場（感染防止対策のため一部講義のみ）

神戸大学統合研究拠点 セミナー室（兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-48）

※新型コロナウイルス感染症防止のため、15回中4回*のみ上記会場からの配信

その他11回は、講師所属先からの直接配信となり、会場での開催はなし

インターネット講義配信

インターネット会議システムサービス「Zoom」を使用し、受講者へ同時配信。

オンデマンド再放送

講義翌日の木曜16時から金曜日正午までの20時間程度、再放送を公開

担当講師

- ・中村 周吾（東洋大学 情報連携学部 教授）
- ・岡田 随象（大阪大学 大学院医学系研究科 教授）
- ・村松 知成（東京大学 大学院農学生命科学研究科 特任准教授）
- ・山下 恵太郎（MRC 分子生物学研究所 Postdoctoral Scientist）
- ・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）
- ・大田 雅照（理化学研究所 計算科学研究センター HPC/AI 駆動型医薬プラットフォーム部
門 AI創薬連携基盤ユニット 上級研究員）*
- ・常田 貴夫（北海道大学理学部 CREST 特別研究員／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）*
- ・松林 伸幸（大阪大学基礎工学研究科 化学工学領域 教授）

- ・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 生体分子シミュレーショングループ グループリーダー）
- ・広川 貴次（筑波大学医学医療系 教授）*
- ・山下 宙人（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 室長／理化学研究所 革新知能統合研究センター チームリーダー）
- ・柳澤 琢史（大阪大学 高等共創研究院 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）
- ・木村 建次郎（神戸大学数理・データサイエンスセンター 教授）
- ・松村 泰志（独立行政法人国立病院機構 大阪医療センター 院長／大阪大学名誉教授・招聘教授（医療情報学担当）*）

講義内容

第1編 生命科学のためのデータサイエンスの基礎
<p>[参考図書]</p> <p>講義 1.1</p> <ul style="list-style-type: none"> ・進化で読み解く バイオインフォマティクス入門, 長田著, 森北出版, 2019 ・[第3版] Python 機械学習プログラミング 達人データサイエンティストによる理論と実践, Raschka, Mirjalili 著, 福島監訳, インプレス, 2020 <p>講義 1.2</p> <p>ゼロから実践する 遺伝統計学セミナー、岡田随象、羊土社</p> <p>講義 1.3</p> <ul style="list-style-type: none"> ・「入門 自然言語処理」Steven Bird, Ewan Klein, Edward Loper 著 萩原 正人、中山 敬広、水野 貴明 訳 オライリージャパン(2010) <p>講義 1.4</p> <ul style="list-style-type: none"> ・G Rhodes 著「Crystallography Made Crystal Clear」(X線結晶構造解析初心者向け) ・https://em-learning.com/ (電子顕微鏡単粒子構造解析法の学習)
<p>1.1 「機械学習・深層学習と生命科学」(担当: 中村 周吾)</p> <p>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、アミノ酸配列、生体分子立体構造等に機械学習・深層学習の方法を適用するインフォマティクス解析、分子構造に物理化学の手法を適用するシミュレーション解析が行われてきた。本講義では、社会全体に急速に応用が広がった機械学習・深層学習の方法の原理と、それがタンパク質のアミノ酸・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。</p>
<p>1.2 「遺伝統計学で迫る疾患病態解明、創薬、個別化医療」(担当: 岡田 随象)</p> <p>遺伝統計学は、遺伝情報と形質情報の因果関係を統計学の観点から検討する学問分野である。数百万人規模の大規模ヒト疾患ゲノム情報を大容量のオミクスデータと分野横断的に解釈し、社会還元するための学問へのニーズが高まっている。細胞組織特異性に着目した疾患病態の解明、メタゲノム・メタボローム解析等の新規オミクス情報層の開拓、機械学習・深層学習など革新的情報処理技術</p>

の適用、ゲノム情報に基づく新規創薬の試み、ゲノム個別化医療の社会実装など、遺伝統計学が今後取り組むべき課題を本講演では紹介する。

1.3 「文献データマイニングの基礎」 (担当：村松 知成)

文献データマイニングとは、巨大な文献データを用い、その中の個別の対象（単語、熟語、用語）の性質や意味などの情報、あるいは対象間の関係性などを統合的に導き出すことを目指す手法である。手順としては文章の局所領域（文、パラグラフなど）から情報を抽出し文献データ全体にわたって統合する。この手法の概要ならびに約3千万件の医学・生物学文献情報を有するPubMedデータベースを用いた我々の取り組みを紹介する。

1.4 「結晶学・単粒子解析による分子構造データの基礎」 (担当：山下 恵太郎)

Protein Data Bank (PDB)にはタンパク質・核酸をはじめとする生体高分子の多種多様な立体構造情報が蓄積されている。本講義ではこのうち大部分を占めるX線結晶構造解析と、近年の技術革新により急速に分解能・解析例ともに伸びてきているクライオ電子顕微鏡（単粒子解析法）に焦点を当てて説明する。特に、立体構造情報を利用する立場の方々に知っておいて欲しいことについて議論したい。

1.5 「機械学習によるタンパク質立体構造予測」 (担当：富井 健太郎)

AlphaFold 2 の登場により、タンパク質アミノ酸配列からの立体構造予測の精度が格段に向上した。これは、タンパク質の配列および立体構造データの蓄積と、深層学習の発達に負うところが大きい。本講義では、タンパク質立体構造予測の近年の潮流を軸に、立体構造予測法の基礎や立体構造解析/決定への応用などについて紹介する。

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

[参考図書]

講義 2.1

- ・ “kGCN: a graph-based deep learning framework for chemical structures”, R. Kojima, S. Ishida, M. Ohta, H. Iwata, T. Honma & Y. Okuno, J. Cheminform., 2020, 12, Article number: 32 Open access: kGCN の紹介。マルチモーダルおよびマルチタスク法による活性予測例、説明可能なAI (Explainable AI, XAI) の例・手法説明などあり。

- ・ タンパク質立体構造に基づく創薬における人工知能技術の応用、大田雅照、池口満徳、MEDCHEM NEWS Vol. 28 No. 4 pp175 (2018) : LINC コンソーシアムにおけるタンパク質立体構造創薬人工知能技術の紹介

- ・ AI を用いた分子立体構造に基づく新規分子構造生成、大田 雅照、CBI 学会誌 2019 年第 7 巻第 2 号 pp54~ : ホットトピックス (文献紹介)

- ・ “Artificial intelligence in drug design: algorithms, applications, challenges and ethics”, Alya A Arabi, Future Drug Discov., 2021 Open access: 最近の review

講義 2.2

常田 貴夫「密度汎関数法の基礎」(講談社)

講義 2.3

- ・ <https://sourceforge.net/p/ermod/wiki/doc-LectureNotes/>

- ・ <https://sourceforge.net/p/ermod/wiki/doc-Theories/>

・Free-energy analysis of protein solvation with all-atom molecular dynamics simulation combined with a theory of solutions, N. Matubayasi, Current Opinion in Structural Biology, 43, 45-54 (2017). DOI: 10.1016/j.sbi.2016.10.005

講義 2.4

- ・「タンパク質計算科学」神谷、肥後、福西、中村著 共立出版
- ・「エピジェネティクス——新しい生命像をえがく」(岩波新書)中野徹
- ・「エピジェネティクス革命」丸善、ネッサ キャリー(著), 中山 潤一(翻訳)
- ・「遺伝子発現制御機構」田村、浦編 東京化学同人

2.1 「AI を用いた創薬の新展開」(担当: 大田 雅照) *

深層学習(Deep Learning)を筆頭とする人工知能(Artificial Intelligence, AI)技術は、様々な分野で社会にインパクトを与え、イノベーションを引き起こしつつある。本講義では、創薬、特に活性物質取得から前臨床研究における、その具体的な応用例を示すと共に、その基盤となっている多様なAI技術を紹介する。AIの創薬応用について、理論と応用の両側面から理解することにより、創薬現場において、その具体的な応用を発案・実施できるようにすることを狙いとする。

2.2 「分子軌道認証: データ科学を利用した簡便な反応電子論」(担当: 常田 貴夫)

*

有機電子論やフロンティア軌道論のような反応電子論は、電子の動きをもとに反応の駆動要因を解釈する簡便な手法である。定量的軌道エネルギーをもとにこれを展開した反応性軌道エネルギー論は、反応を駆動する反応性軌道を特定できる。最近、この理論に機械学習を導入し、反応前後の情報だけで分子軌道の対応関係を求める分子軌道認証を開発した。本講義では、分子軌道認証を説明するとともに、認証により明らかになった先進的な電子論的反応解釈を紹介する。

2.3 「溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析」

(担当: 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現する。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系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。

2.4 「分子モデリング・シミュレーションから見るクロマチンポテンシャル」

(担当: 河野 秀俊)

真核生物のゲノムはクロマチンとして細胞核にコンパクトに収納されている。その収納状態は、クロマチンの翻訳後修飾(エピジェネティックな変化)に応じて変化し、遺伝子の発現制御と密接な関係があることが分かってきた。本講義では、クロマチンの分子構造とそのダイナミクスについて、研究の最前線を紹介する。

2.5 「インシリコ創薬の基礎と応用」

(担当：広川 貴次) *

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。さらに応用事例についても国内外の先行研究をいくつか紹介したい。

第3編 ビッグデータ・AI の健康科学への活用

[参考図書]

講義 3.1

1. Baillet, Sylvain, John C. Mosher, and Richard M. Leahy. "Electromagnetic brain mapping." IEEE Signal processing magazine 18.6 (2001): 14-30.
2. 宮内 哲, 脳を測る, 心理学評論, 2013, 56 巻, 3 号, p. 414-454
3. Baillet, Sylvain. "Magnetoencephalography for brain electrophysiology and imaging." Nature neuroscience 20.3 (2017): 327-339.

講義 3.2

1. 「越境する脳 ブレイン・マシン・インターフェースの最前線」 Miguel Nicolelis 早川書房
2. T. Yanagisawa et al., BCI training to move a virtual hand reduces phantom limb pain, Neurology, 95(4):e417-e426, 2020.
3. T. Yanagisawa, et al., Induced sensorimotor brain plasticity controls pain in phantom limb patients, Nature Communications, 7, 13209, 2016
4. Yanagisawa T, et al., Electrocorticographic control of a prosthetic arm in paralyzed patients, Annals of Neurology, 71 (3):353-61, 2021

講義 3.3

・核酸科学ハンドブック 日本核酸化学会(監修)、杉本直己(編集) 講談社

講義 3.4

Introduction to subsurface imaging

(Saleh, Bahaa Cambridge University Press, 2011)

講義 3.5

・医療情報 第6版 医療情報システム編 篠原出版新社

(3-5の講義内容は掲載されていません。医療情報システムの基礎的なことを理解する上での参考図書として)

3.1 「電流源推定を用いたヒト脳機能研究」 (担当：山下 宙人)

脳波・脳磁図 (EEG・MEG) は聴覚検査やてんかん術前診断などの臨床応用だけでなく、ヒトの脳活動ダイナミクスを調べる方法として認知神経科学の基礎研究にも利用されてきた。近年、計測の多チャンネル化・計算機の高性能化・脳構造モデルの高精度化に伴い、EEG・MEGの生データから脳内の活動源をイメージングする“電流源推定法”の重要性が増してきている。本講義では、電流源推定法の研究動向、技術的背景、当研究チームで行っている最近の研究について解説する。

3.2 「Brain-Computer Interface による脳情報の伝達と修飾」 (担当: 柳澤 琢史)

脳波などを機械学習によって解読 (Decoding) し、その情報に基づいて機械を制御する Brain-Computer Interface (BCI) は、脳と AI を融合する技術でもある。特に、侵襲的脳信号を用いた高精度の脳情報解読による BCI は医療応用が期待されている。本講義では、BCI の基礎から臨床応用の現状を説明し、BCI が脳に及ぼす影響について、幻肢痛に対する BCI 治療を例として議論する。

3.3 「立体構造情報を活用した核酸医薬品・核酸標的的低分子医薬品のデザイン」 (担当: 近藤 次郎)

DNA や RNA といった核酸分子は、医薬品としても、医薬品の標的としても、創薬分野で注目を集めている。核酸医薬品は低分子医薬品、タンパク質医薬品に次ぐニューモダリティとして次々と上市されている。また、タンパク質を標的としてきた従来の低分子医薬品を、核酸を新たな標的とすることで再利用する動きもある。本講義では、当研究室で行っている核酸の立体構造情報を活用したドラッグデザインについて紹介し、計算科学が関わる核酸創薬の将来展望についてお話ししたい。

3.4 「命を救う数式」 (担当: 木村 建次郎)

病院にあるレントゲンや CT のような、強いエネルギーの電磁波ではなく、異なる物質の界面で大きく散乱する弱いエネルギーをもつ電磁波、すなわち散乱性の高い電磁波を使ってその散乱波から物体の形を導き出す『多重経路散乱場理論』の開発に世界で初めて成功した。この問題は“波動散乱逆問題”といわれ、応用数学史上の未解決問題として知られている。本講義では、その数学上の問題を解決し、スタートアップの創業として様々な分野に社会実装した経緯についてお話しする。

3.5 「有効な Real World Data を集積するための戦略」 (担当: 松村 泰志)

*

医療情報が電子化され、このデータを利用することで臨床研究に利用するコンセプトが打ち出され、海外では成功事例があり、国際的に注目されてきている。しかし、日本では目立った成功事例は出ていない。医療情報が電子化されたことと、これを研究利用可能とすることとの間にはギャップがあり、これを乗り越えなければ Real World Data を活用できるようにはならない。このギャップとは何か、どうすれば乗り越えることができるのかについて講義する。

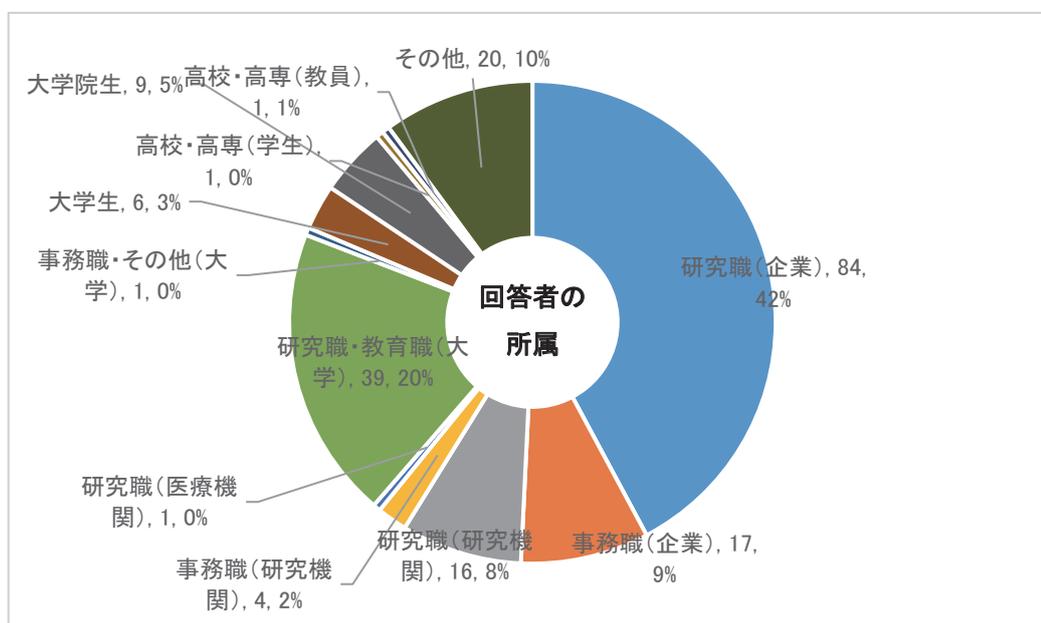
受講者アンケート（講義終了後）

【調査概要】

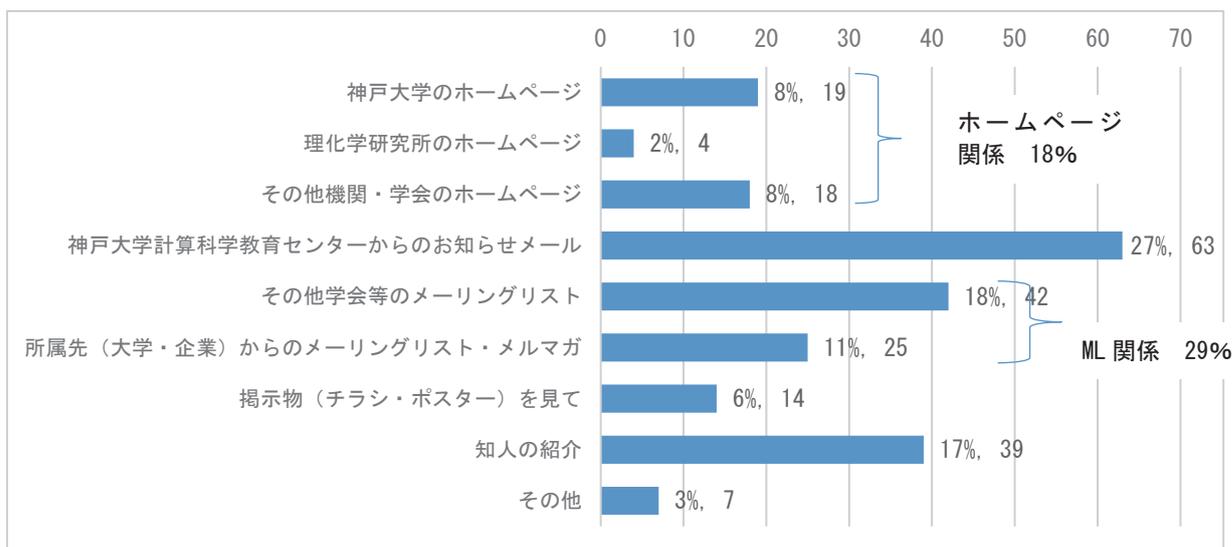
1. 対象 「計算生命科学の基礎8」の受講登録者
2. 標本数 1,366人（2022年2月2日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査機関 2022年2月7日（月）～2022年2月25日（金）
5. 回収数 199
6. 回収率 約14.4%

【アンケート結果】※アンケート結果の内容を一部抜粋

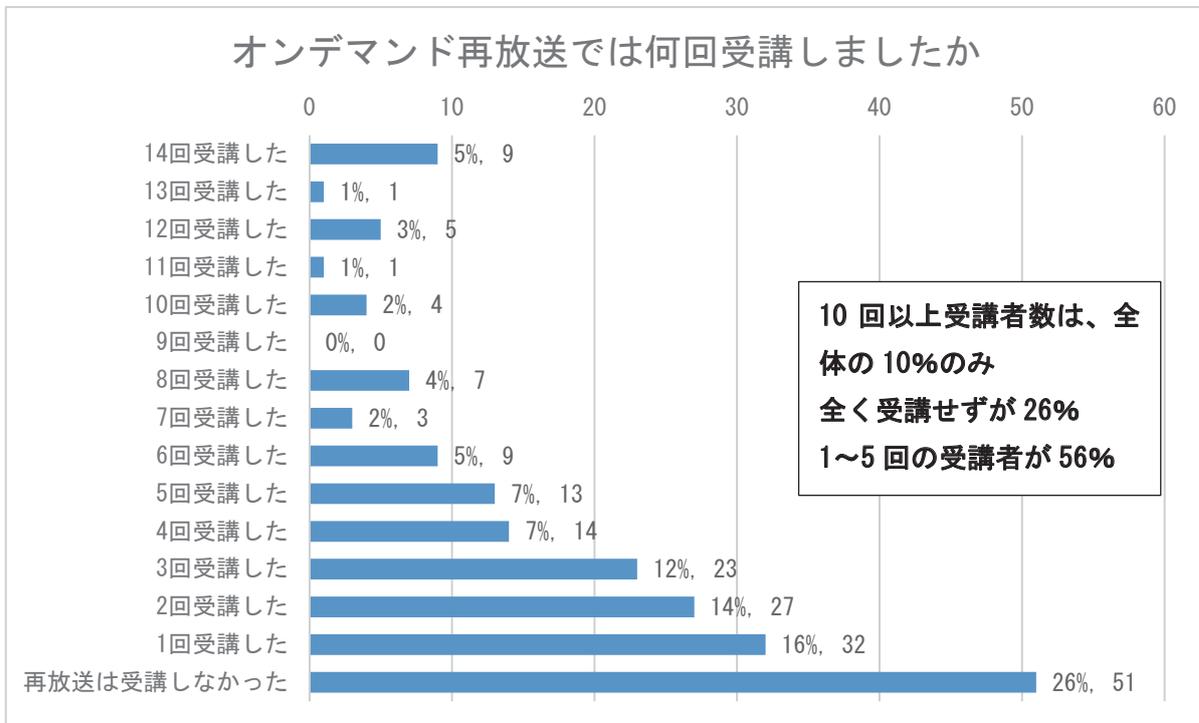
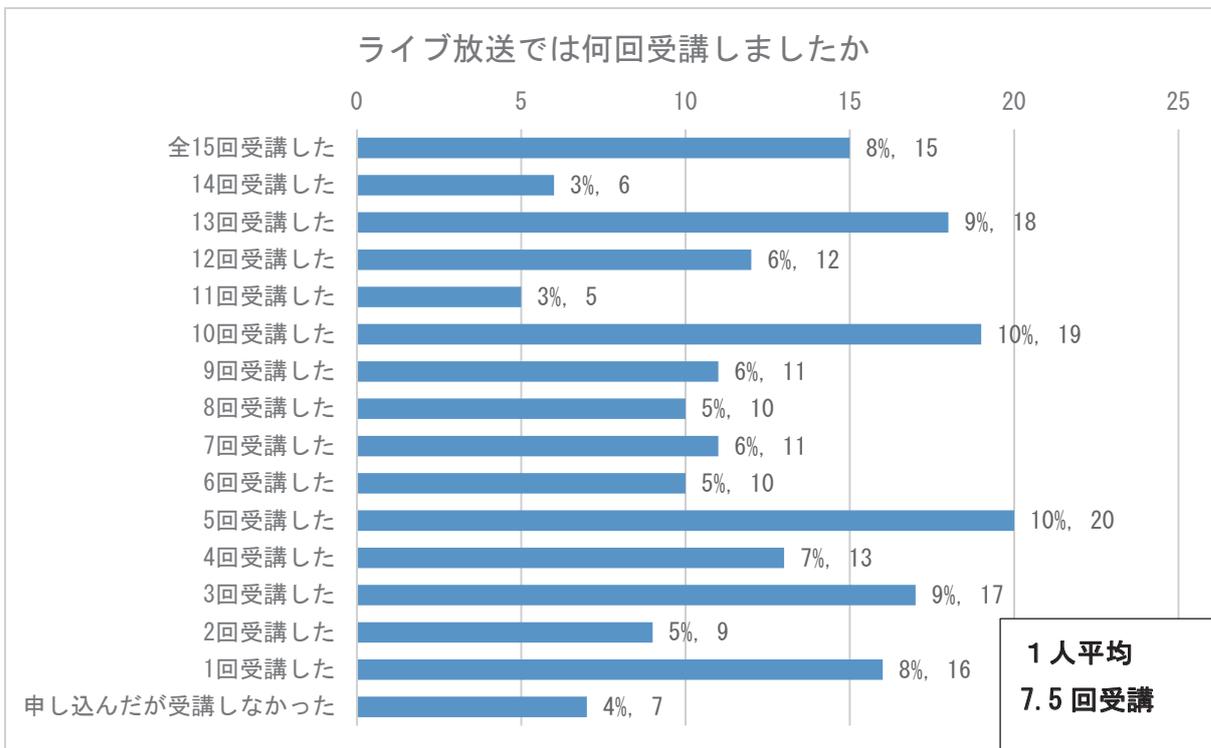
1. 所属について



2. 講義を知ったきっかけについて（回答数が多かったもの）

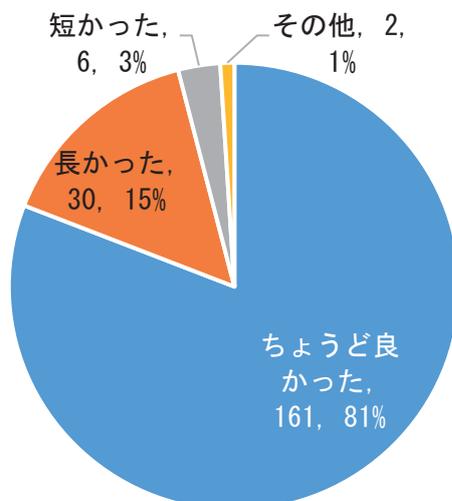


3. 受講回数

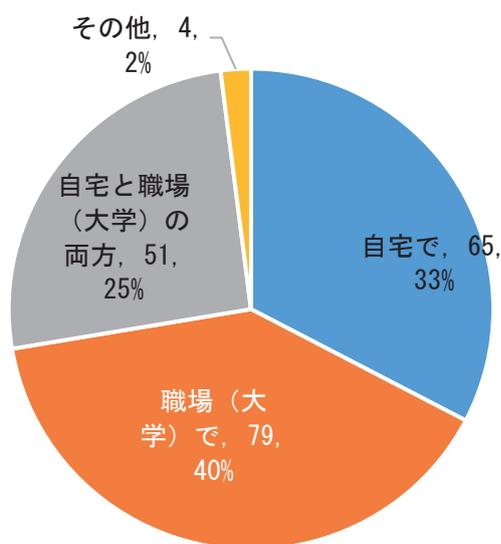


※1回のみ講師都合で再放送を行わなかった回があったため、最大で14回となる。

4. 講義時間（質疑応答含め90分）は適切だったか



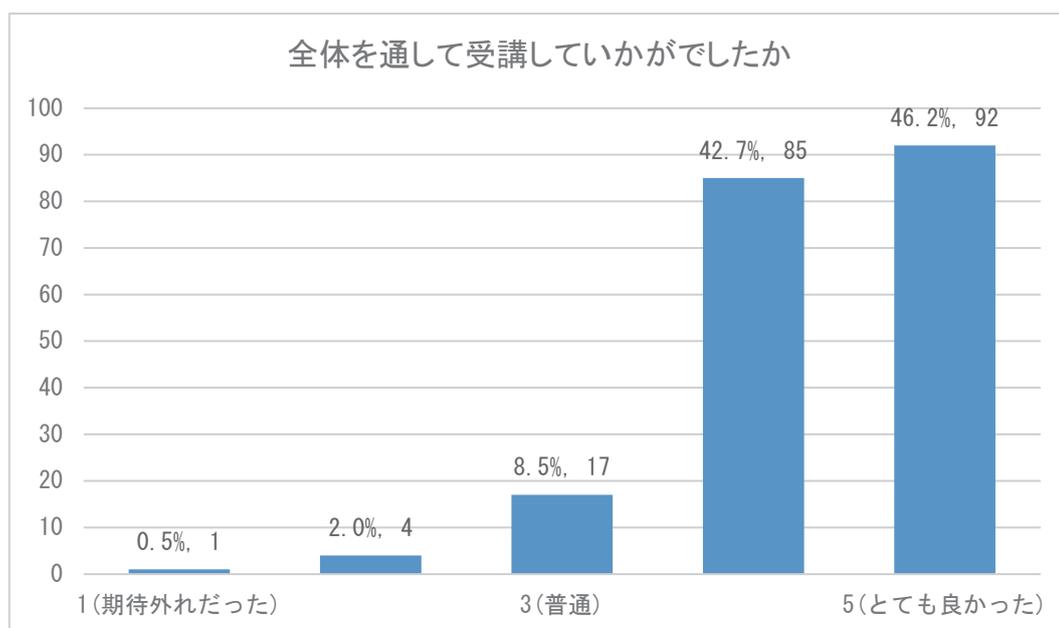
5. 受講場所について



自宅のみの受講者は、25%（19年）→39%（20年）→33%（21年）となり、21年度は20年度よりはやや減少した。

6. 講義全体の感想について

- ・ 将来の進路を考える一環として参加させて頂いたのですが、その1つのヒントを得られたような気がして個人的には大きな収穫になったと思います。関係者の皆様本当にありがとうございました。
- ・ 研究所の先生は基礎的な話ができませんし、応用の話を学部生に聞かせても無駄だと思います。大学の教員に基礎的な話をして頂いた方が学部生にとっては有り難いと思います
- ・ 高校生～社会人まで幅広い参加者を対象としているため、講義内容の難易度が講師によって異なるような気がしました。(どの程度が良いか、というのはなかなか難しいと思いますが)
- ・ 本講義の少し趣旨とずれるかと思いますが、やはり一からご教示いただき、やり方を習熟できるような演習スタイルの講義が受講したいと思いました。
- ・ 講師の先生方にとって、質疑応答にすべて答えなくてはいけないのは少し負担なのではないでしょうか。
- ・ 概要については理解が深まったが、具体的な計算方法までは理解が出来なかったので、計算方法の詳細にも触れてみたい。
- ・ オンデマンド再放送があり、助かりました。視聴期間がもう少しながいと助かります。
- ・ オンデマンドについては、会議などで出席ができなかったときに大変助かりました。また、専門外分野で一度では理解できなかったところや聴き逃したところについても再度確認できること、速度を変えて聞けること、そういった点でも助かりました。
- ・ 録画配信の期間が短すぎる。1週間ぐらい欲しい。
- ・ 録画資料可能期間が短すぎる。せめて直近の週末までは見れるようにしてほしい。(他、再放送の期間をもっと伸ばしてほしいという声が多数)



アーカイブ公開

公開許可のある講義のみ、共催の理化学研究所計算科学研究センターのホームページ e ラーニングアーカイブ (<https://www.r-ccs.riken.jp/about/careers/e-learning/intro-com-life-sci/>) にて公開。

計算生命科学の基礎8 文献データマイニングの基礎

文献データマイニングとは、巨大な文献データを用い、その中の個別の対象（単語、熟語、用語）の性質や意味などの情報、あるいは対象間の関係性などを統合的に導き出すことを目指す手法である。手順としては文章の局所領域（文、パラグラフなど）から情報を抽出し文献データ全体にわたって統合する。この手法の概要ならびに約3千万件の医学・生物学文献情報を有するPubMedデータベースを用いた我々の取り組みを紹介する。

[計算生命科学の基礎8](#) □

[YouTubeリンク「文献データマイニングの基礎」①](#) □

[YouTubeリンク「文献データマイニングの基礎」②](#) □

[YouTubeリンク「文献データマイニングの基礎」③](#) □



[トップページ](#) > [計算科学研究センターとは](#) > [人材育成](#) > [計算科学eラーニング](#) > [生命科学](#) > [計算生命科学の基礎](#) > [計算生命科学の基礎8 \(2021\)](#)

計算生命科学の基礎8 (2021)



2021年10月20日	レベル2	計算生命科学の基礎8 文献データマイニングの基礎
2021年10月27日	レベル2	計算生命科学の基礎8 結晶学・単粒子解析による分子構造データの基礎
2021年11月17日	レベル2	計算生命科学の基礎8 分子軌道認証：データ科学を利用した簡便な反応電子論
2021年11月24日	レベル2	計算生命科学の基礎8 溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析
2021年12月8日	レベル2	計算生命科学の基礎8 インシリコ創薬の基礎と応用
2021年12月15日	レベル2	

[遠隔インタラクティブ講義] 未来の医療と創薬へつながる生命科学のデータサイエンスとシミュレーション技術

計算生命科学の基礎8

企画協力: 日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

生命のしくみを理解しようとする基礎生物学や人類の未来を担う健康・医療活動と連動しながら発展してきた生命科学の重要性は言うまでもないことでしょ。このような生命科学の発展にはゲノム情報や生体分子の立体構造などのビッグデータを扱うデータサイエンスが貢献しており、ディープラーニングに代表される機械学習やAIにより未知の現象の予測をすることが可能となってきました。また様々なデータをシミュレーション技術により解析することによって、生体分子からマクロな生命現象までの多様な階層を定量的に理解することも行われてきています。このような計算生命科学は、お互いが融合することにより基本的な生物学のより進んだ理解から医学・薬学、農学や健康関連分野などのさらなる発展に寄与しています。本講義では以上のように発展してきた計算生命科学の基礎、そしてそれに基づいた現在から未来への医療・創薬に貢献できる知識を提供いたします。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、その基礎や現状、将来の展望等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、この学際的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。

2021 **10.6 WED** \ 2022 **2.2 WED**

毎週水曜日 [全15回] 17:00 - 18:30

※ただし11/3 (水・祝) のみ、11/4 (木) の開講

神戸大学計算科学教育センター セミナー室208より配信

[担当講師]

- 中村 周吾 東洋大学 情報連携学部 教授
- 岡田 随象 大阪大学大学院医学系研究科 教授
- 村松 知成 東京大学大学院農学生命科学研究科 特任准教授
- 山下 恵太郎 英国MRC分子生物学研究所 Postdoctoral Scientist
- 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
- 大田 雅照 理化学研究所計算科学研究センター HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門 AI創薬連携基盤ユニット 上級研究員
- 常田 貴夫 北海道大学理学部CREST特別研究員 / 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
- 松林 伸幸 大阪大学基礎工学研究科 化学工学領域 教授
- 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 生体分子シミュレーショングループ グループリーダー
- 広川 貴次 筑波大学医学医療系 教授
- 山下 宙人 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 室長 / 理化学研究所 革新知能統合研究センター チームリーダー
- 柳澤 琢史 大阪大学 高等共創研究院 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
- 木村 建次郎 神戸大学数理・データサイエンスセンター 教授
- 松村 泰志 独立行政法人国立病院機構 大阪医療センター 院長 / 大阪大学名誉教授・招聘教授 (医療情報学担当)

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、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科学分野、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8 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

10.6 [水] 機械学習・深層学習と生命科学

初心者向け

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、アミノ酸配列、生体分子立体構造等に機械学習・深層学習の方法を適用するインフォーマティクス解析、分子構造に物理化学的手法を適用するシミュレーション解析が行われてきた。本講義では、社会全体に急速に応用が広がった機械学習・深層学習の方法の原理と、それがタンパク質のアミノ酸・立体構造の解析にどのように応用されているのかを、実際に交えて紹介する。

10.13 [水] 遺伝統計学で迫る疾患病態解明、創薬、個別化医療

岡田 随象(大阪大学大学院 医学系研究科 教授)

遺伝統計学は、遺伝情報と形質情報の因果関係を統計学の観点から検討する学問分野である。数百万人規模の大規模ヒト疾患ゲノム情報を大容量のオミクスデータと分野横断的に解釈し、社会還元のための学問へのニーズが高まっている。細胞組織特異性に着目した疾患病態の解明、メタゲノム・メタボローム解析等の新規オミクス情報層の開拓、機械学習・深層学習など革新的情報処理技術の適用、ゲノム情報に基づく新規創薬の試み、ゲノム個別化医療の社会実装など、遺伝統計学が今後取り組むべき課題を本講演では紹介する。

10.20 [水] 文献データマイニングの基礎

村松 知成(東京大学大学院農学生命科学研究科 特任准教授)

文献データマイニングとは、巨大な文献データを用い、その中の個別の対象(単語、熟語、用語)の性質や意味などの情報、あるいは対象間の関係性などを統合的に導き出すことを目指す手法である。手順としては文章の局所領域(文、パラグラフなど)から情報を抽出し文献データ全体にわたって統合する。この手法の概要ならびに約3万件的医学・生物学文献情報を有するPubMedデータベースを用いた我々の取り組みを紹介する。

10.27 [水] 結晶学・単粒子解析による分子構造データの基礎

山下 恵太郎(英国MRC分子生物学研究所 Postdoctoral Scientist)

Protein Data Bank (PDB)にはタンパク質・核酸をはじめとする生体高分子の多種多様な立体構造情報が蓄積されている。本講義ではこのうち大部分を占めるX線結晶構造解析と、近年の技術革新により急速に分解能・解析例ともに伸びてきているクライオ電子顕微鏡(単粒子解析法)に焦点を当て説明する。特に、立体構造情報を利用する立場の方々にとって欲しいことについて議論したい。

11.4 [水] 機械学習によるタンパク質立体構造予測

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)

AlphaFold 2の登場により、タンパク質アミノ酸配列からの立体構造予測の精度が格段に向上した。これは、タンパク質の配列および立体構造データの蓄積と、深層学習の発達に負うところが大きい。本講義では、タンパク質立体構造予測の近年の潮流を軸に、立体構造予測法の基礎や立体構造解析/決定への応用などについて紹介する。

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

11.10 [水] AIを用いた創薬の新展開

大田 雅照(理化学研究所計算科学研究センター HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門 AI創薬連携基盤ユニット 上級研究員)

深層学習(Deep Learning)を筆頭とする人工知能(Artificial Intelligence, AI)技術は、様々な分野で社会にインパクトを与え、イノベーションを引き起こしつつある。本講義では、創薬、特に活性物質取得から前臨床研究における、その具体的な応用例を示すと共に、その基盤となっている多様なAI技術を紹介する。AIの創薬応用について、理論と応用の両側面から理解することにより、創薬現場において、その具体的な応用を提案・実施できるようにすることを狙いとする。

11.17 [水] 分子軌道認証:データ科学を利用した簡便な反応電子論

初心者向け

常田 貴夫(北海道大学理学部CREST特別研究員/ 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)

有機電子論やフロンティア軌道論のような反応電子論は、電子の動きをもとに反応の駆動要因を解釈する簡便な手法である。定量的軌道エネルギーをもとにこれを展開した反応性軌道エネルギー論は、反応を駆動する反応性軌道を特定できる。最近、この理論に機械学習を導入し、反応前後の情報だけで分子軌道の対応関係を求める分子軌道認証を開発した。本講義では、分子軌道認証を説明するとともに、認証により明らかになった先進的な電子論的反応解釈を紹介する。

11.24 [水] 溶液中における生体関連分子複合系の自由エネルギー解析

初心者向け

松林 伸幸(大阪大学 基礎工学研究科 化学工学領域 教授)

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現する。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系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、溶媒と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。

12.1 [水] 分子モデリング・シミュレーションから見るクロマチンポテンシャル

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 生体分子シミュレーショングループ グループリーダー)

真核生物のゲノムはクロマチンとして細胞核にコンパクトに収納されている。その収納状態は、クロマチンの翻訳後修飾(エピジェネティックな変化)に応じて変化し、遺伝子の発現制御と密接な関係があることが分かってきた。本講義では、クロマチンの分子構造とそのダイナミクスについて、研究の最前線を紹介する。

12.8 [水] 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。さらに応用事例についても国内外の先行研究をいくつか紹介したい。

第3編 未来をみすえた医療、創薬への応用

12.15 [水] 電流源推定を用いたヒト脳機能研究

初心者向け

山下 宙人(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 室長/理化学研究所 革新知能統合研究センター チームリーダー)

脳波・脳磁図(EEG・MEG)は脳検査やてんかん術前診断などの臨床応用だけでなく、ヒトの脳活動ダイナミクスを調べる方法として認知神経科学の基礎研究にも利用されてきた。近年、計測の多チャンネル化・計算機の高性能化・脳構造モデルの高精度化に伴い、EEG・MEGの生データから脳内の活動源をイメージングする“電流源推定法”の重要性が増してきている。本講義では、電流源推定法の研究動向、技術的背景、当研究チームで行っている最近の研究について解説する。

1.12 [水] Brain-Computer Interfaceによる脳情報の伝達と修飾

柳澤 琢史(大阪大学 高等共創研究院 教授)

脳波などを機械学習によって解釈(Decoding)し、その情報に基づいて機械を制御するBrain-Computer Interface (BCI)は、脳とAIを融合する技術でもある。特に、重要な脳信号を用いた高精度の脳情報解読によるBCIは医療応用が期待されている。本講義では、BCIの基礎から臨床応用の現状を説明し、BCIが脳に及ぼす影響について、幻肢痛に対するBCI治療を例として議論する。

1.19 [水] 立体構造情報を活用した核酸医薬品・核酸標的の低分子医薬品のデザイン

初心者向け

近藤 次郎(上智大学 理工学部 物質生命理工学 准教授)

DNAやRNAといった核酸分子は、医薬品としても、医薬品の標的としても、創薬分野で注目を集めている。核酸医薬品は低分子医薬品、タンパク質医薬品に次ぐニューモダリティとして次々と上市されている。また、タンパク質を標的としてきた従来の低分子医薬品を、核酸を新たな標的とすることで再利用する動きもある。本講義では、当研究室で行っている核酸の立体構造情報を活用したドラッグデザインについて紹介し、計算科学が関わる核酸創薬の将来展望についてお話ししたい。

2.1 [火] 命を救う数式

木村 建次郎(神戸大学数理学部 データサイエンスセンター 教授)

病院にあるレントゲンやCTのような、強いエネルギーの電磁波ではなく、異なる物質の界面で大きく散乱する弱いエネルギーをもつ電磁波、すなわち散乱性の高い電磁波を使ってその散乱波から物体の形を導き出す「多重経路散乱場理論」の開発に世界で初めて成功した。この問題は“波動散乱逆問題”といわれ、応用数学史上の未解決問題として知られている。本講義では、その数学上の問題を解決し、スタートアップの創業者として様々な分野に社会実装した経緯についてお話しする。

2.2 [水] 有効なReal World Dataを集積するための戦略

松村 泰志(独立行政法人国立病院機構 大阪医療センター 院長 / 大阪大学名誉教授・招聘教授(医療情報学担当))

医療情報が電子化され、このデータを利用することで臨床研究に利用するコンセプトが打ち出され、海外では成功事例があり、国際的に注目されてきている。しかし、日本では目立った成功事例は出ていない。医療情報が電子化されたこと、これを研究利用可能とすることの間にはギャップがあり、これを乗り越えなければReal World Dataを活用できるようにはならない。このギャップとは何か、どうすれば乗り越えることができるのかについて講義する。



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 上級研究員)、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 量子生命科学研究所 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専攻 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)、間島 慶(量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命情報科学グループ 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 量子生命情報科学グループ グループリーダー)

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

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センター
ls-jimu@eccse.kobe-u.ac.jp



2022年度
計算生命科学の基礎 9

目的

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。

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

共催、後援、協力

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 ビッグデータ医科学分野、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、公益財団法人都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西日本薬学会

企画協力：CBI 学会、日本バイオインフォマティクス学会

運営体制

▼企画コーディネーター

- 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 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 特命教授)
- 森 義治 (神戸大学大学院システム情報学研究科 講師)
- 八幡 憲明 (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)

▼配信・運営担当

- 臼井 英之（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）
近藤 洋隆（合同会社 VRAIDE／関西大学先端科学技術推進機構）
倉 仁美（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）
坪川 栄樹（神戸大学大学院システム情報学研究科システム情報学専攻）

開催日程

2022年10月5日～2023年2月1日 毎週水曜日、全15回 17:00-18:30

オンライン配信開催

インターネット会議システムサービス「Zoom」を使用し、任意の場所に在籍する講師の講義を神戸大学の事務局を介して、全国の受講生に配信した。（新型コロナウイルス対応のため）講義2-4「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」のみ、会場（神戸大学統合研究拠点2階セミナー室、兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-48）での開催を行った。また、講義3-4「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」は会場での開催を予定していたが、悪天候のため急遽オンライン開催となった。

オンデマンド再放送

翌日の木曜日16時から日曜日24時までの3日半程度公開

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）
- ・ 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）
- ・ 重田 育照（筑波大学計算科学研究センター 教授）
- ・ 篠田 渉（岡山大学 異分野基礎科学研究所 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）
- ・ 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）

講義内容

第1編 生命科学のためのデータサイエンスの基礎
<p>[参考図書]</p> <p>講義 1.1</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 藤博幸 編、よくわかるバイオインフォマティクス入門、講談社、2018 ・ 門田幸二 他 共編著、Web 連携テキスト バイオインフォマティクス、培風館、2022 <p>講義 1.2</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 実験医学増刊 Vol. 39 No. 2 パンデミック時代の感染症研究～病原体の病原性、多様性、生活環から新型コロナウイルスを取り巻く社会の動きまで～ ・ ウイルス 第70巻 第1号 <p>http://jsv.umin.jp/journal/70_1_contens_jpdf.htm</p> <p>講義 1.3</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ タンパク質の立体構造入門——基礎から構造バイオインフォマティクスへ、著：藤 博幸 <p>講義 1.4</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 藤博幸 編、よくわかるバイオインフォマティクス入門、講談社、2018 ・ バイオインフォマティクス入門 第2版、日本バイオインフォマティクス学会 編、慶應技術大学出版社、2021 <p>講義 1.5</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Scikit-Learn、Keras、TensorFlowによる実践機械学習 第2版、Aurélien Géron 著（英語版を推奨） 2) パターン認識と機械学習、C.M. ビショップ 著（英語版を推奨） 3) ベイズ深層学習（機械学習プロフェッショナルシリーズ）、須山敦志 著 4) 曲率とトポロジ、河野俊丈 著
<p>1.1 「ゲノム・トランスクリプトーム解析」（担当：門田 幸二）</p> <p>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。</p>
<p>1.2 「ウイルスの進化ゲノム解析」（担当：中川 草）</p> <p>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。</p>

1.3 「タンパク質の立体構造予測—AlphaFold 以前と以後—」（担当：森脇 由隆）

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らく行われてきた。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。

1.4 「Web を用いた生体高分子の立体構造モデリング」（担当：川端 猛）

生体高分子の立体構造のモデリング法（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、鎖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。

1.5 「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」（担当：舘野 賢）

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また、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

[参考図書]

講義 2.1

- ・新版すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル 平尾公彦（編）
- ・金属錯体の量子・計算化学 錯体化学会選書 山口兆（著）
- ・分子モデリング概説—量子力学からタンパク質構造予測まで A. R. リーチ（著）、江崎俊之（翻訳）
- ・タンパク質計算科学 —基礎と創薬への応用— 中村 春木他（著）

講義 2.2（多少古いものであるが、関連書籍）

[MD 基礎] 「コンピュータシミュレーションの基礎」（第2版）岡崎進、吉井範行著、化学同人

[膜透過] W. Shinoda, BBA-Biomembrane, 1858, 2254-2265 (2016).

[粗視化] Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems, G. Voth ed., CRC press, 2009.

講義 2.4

PT Duy, H Hata, T Ogawa, Y Taira, A Kitao

アンサンブル 22 (2), 151-156 (2020)

<https://doi.org/10.11436/mssj.22.151>

<p>講義 2.5</p> <p>・望月敦史, 理論生物学概論 2021年4月刊行 共立出版 ISBN: 978-4-320-05830-9</p>
<p>2.1 「QM/MMによる酵素反応解析」(担当: 重田 育照)</p> <p>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.</p>
<p>2.2 「生体膜・脂質膜の分子シミュレーション」(担当: 篠田 渉)</p> <p>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.</p>
<p>2.3 「インシリコ創薬の基礎と応用」(担当: 広川 貴次)</p> <p>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. さらに応用事例についても国内外の先行研究をいくつか紹介したい.</p>
<p>2.4 「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」(担当: 北尾 彰朗)</p> <p>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.</p>
<p>2.5 「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」(担当: 望月 敦史)</p> <p>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.</p>

第3編 未来をみすえた医療・創薬への応用

[参考図書]

講義 3.1

- ・小高知宏：基礎から学ぶ 人工知能の教科書、オーム社、2019年
- ・梁川雅弘：放射線科スーパーセクション2021 この発表, この着眼点に注目! Grad-CAM を用いたブラックボックスの解明 人工知能は肺癌 CT のどこをみているのか?, 臨床画像 37 巻 4 号、p464-468、2021年4月
- ・梁川雅弘ら：肺結節・腫瘤の画像診断 人工知能による肺結節の診断、画像診断 42 巻 6 号、p、2022年5月

講義 3.2

1. 片平健太郎「行動データの計算論モデリング 強化学習モデルを例として」
2. Robert C Wilson, Anne GE Collins (2019) Ten simple rules for the computational modeling of behavioral data eLife 8:e49547, <https://doi.org/10.7554/eLife.49547>

講義 3.3

- ・核酸科学ハンドブック 日本核酸化学会（監修）、杉本直己（編集） 講談社
<https://www.kspub.co.jp/book/detail/5207864.html>
- ・生体高分子結晶の X 線結晶解析 実践手法と基礎理論
竹中章郎、熊坂崇、近藤次郎、角南智子、茶竹俊行、森下えら（著）竹中章郎（編集）丸善出版
https://www.maruzen-publishing.co.jp/item/?book_no=304523

講義 3.4

- ・確率的グラフィカルモデル 鈴木 譲・植野 真臣編著 共立出版

講義 3.5

- ・「脳の意識 機械の意識」中央公論新社
“From Biological to Artificial Consciousness” Springer-Nature

3.1 「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」（担当：梁川 雅弘）

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、文献的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。

3.2 「ヒトの行動原理の理解のための数理的アプローチ」（担当：田中 沙織）

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。

3.3 「生命科学・創薬・ものづくりのための核酸構造生物学」（担当：近藤 次郎）

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、事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。

3.4 「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」（担当：玉田 嘉紀）

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、解釈性が高い 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釈を可能にする、発表者が考案した解析法も併せて解説する。

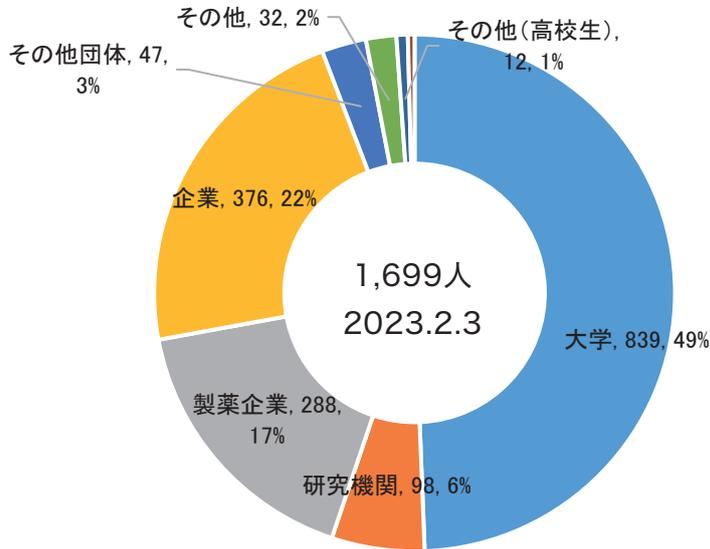
3.5 「意識の科学 -或いはその副産物としての意識のアップロード-」（担当：渡邊 正峰）

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・シンセシス的に意識の自然則を求めることになるが、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。

受講登録者状況等

2022年度は1,699人（最終）

2022年度受講者所属



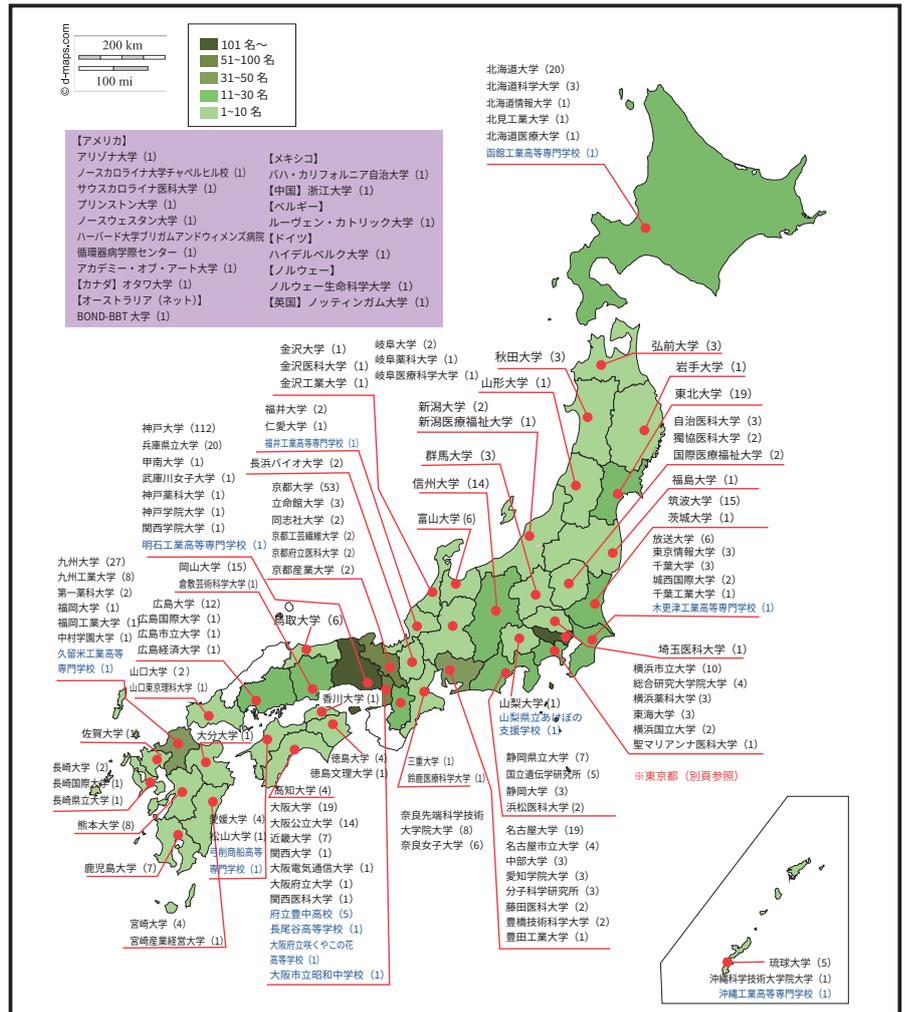
計算生命科学の基礎9 申込登録者所属大学分布

- ・国内149大学(45都道府県)
- ・海外15大学

合計839名

- ・高専7校、高等学校(中学校含む)8校、19名

東京都からの登録者所属大学
を次頁に記載する。



【東京都】 東京大学 (68) 早稲田大学 (24) 東京工業大学 (21) 慶応義塾大学 (13) 順天堂大学 (10) 東京理科大学 (8) 日本大学 (8) 東京医科歯科大学 (7) 東京薬科大学 (7) 東京農工大学 (7) 北里大学 (5) 明治大学 (5)	立教大学 (4) 東邦大学 (3) ヤマザキ動物看護大 学 (3) 東京医科大学 (3) 日本医科大学 (3) 創価大学 (2) 明治薬科大学 (2) 国士舘大学 (2) 電気通信大学 (2) 東京農業大学 (2) 学習院大学 (2) 東京都市大学 (2)	法政大学 (1) 帝京大学 (1) 昭和薬科大学 (1) 東京電機大学 (1) 統計数理研究所 (1) 日本歯科大学 (1) 専修大学 (1) お茶の水女子大学 (1) 星薬科大学 (1) 武蔵野大学 (1) 上智大学 (1) 東京国際工科専門職 大学 (1)	青山学院大学 (1) 工学院大学 (1) 聖徳学園中学校 (1) 女子学院高等学校 (1) 早稲田大学 本庄高等 学院 (1)
---	--	--	--

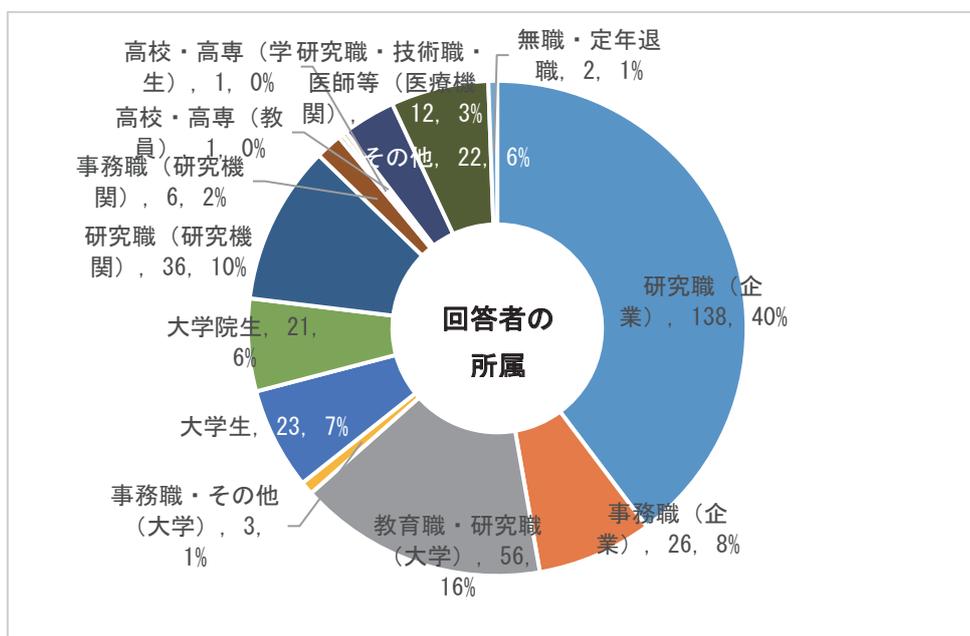
受講者アンケート（講義終了後）

【調査概要】

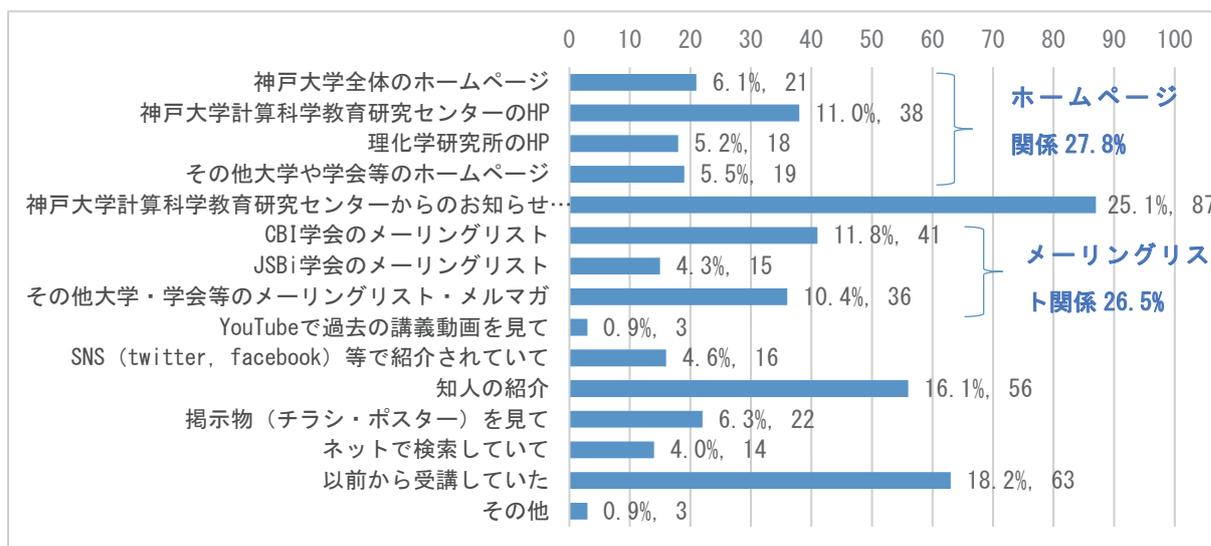
1. 対 象 「計算生命科学の基礎9」の受講登録者
2. 標 本 数 1,699人（2021年2月3日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査機関 2023年2月3日（金）～2023年2月26日（日）
5. 回 収 数 347
6. 回 収 率 約20.4%

【アンケート結果】※アンケート結果の内容を一部抜粋

1. 所属について

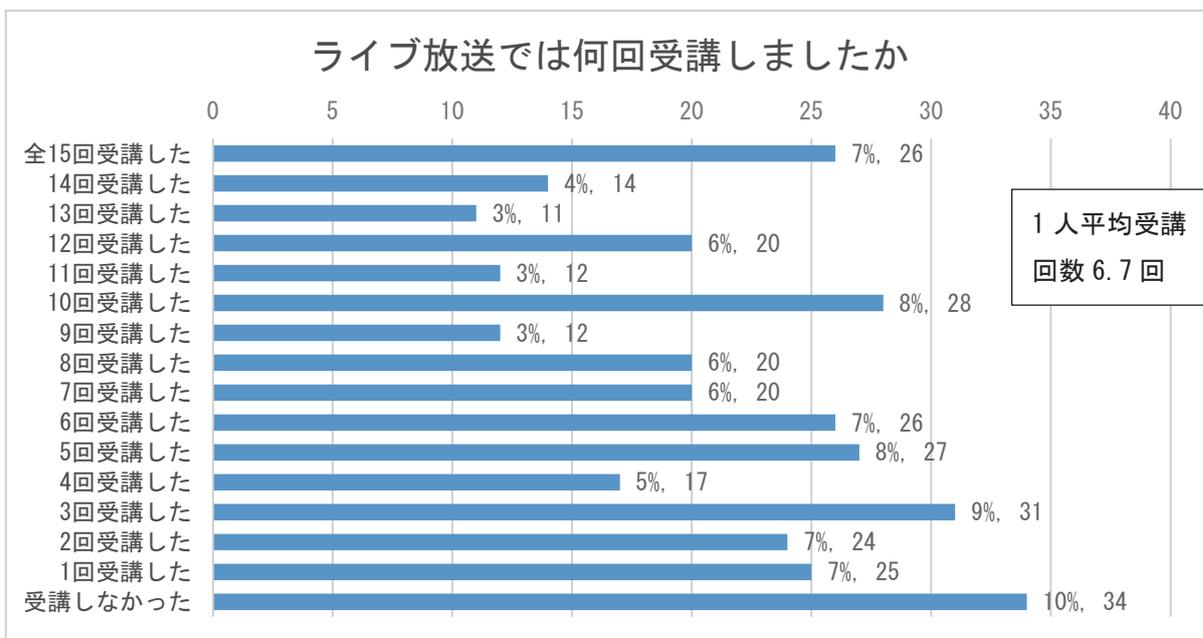


2. 講義を知ったきっかけについて

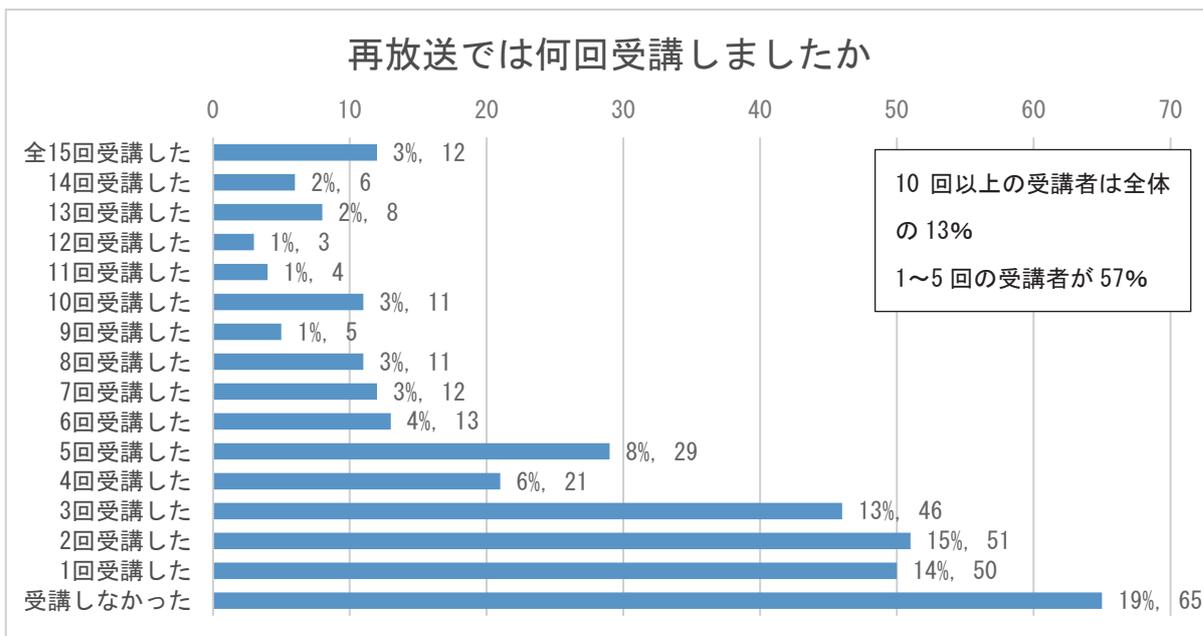


3. 受講回数

- ・ライブ放送の平均受講回数 6.7回
(2020年9.2回→2021年7.5回より更に減少)
- ・ライブでは受講せずの割合：9.8%
(2021年3.5%)

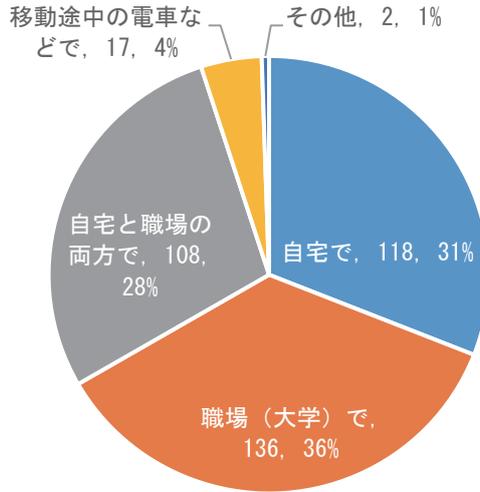


- ・再放送の平均受講回数 4.0回 (2021年度 3.8回より微増)
- ・再放送を全く受講せずの割合：19% (2021年度 26%より減少)



再放送期間を0.5日から3.5日に拡大したこともあり、ライブ配信に限らず、フレックシブルな時間で受講可能なオンデマンド再放送に流れたといえる

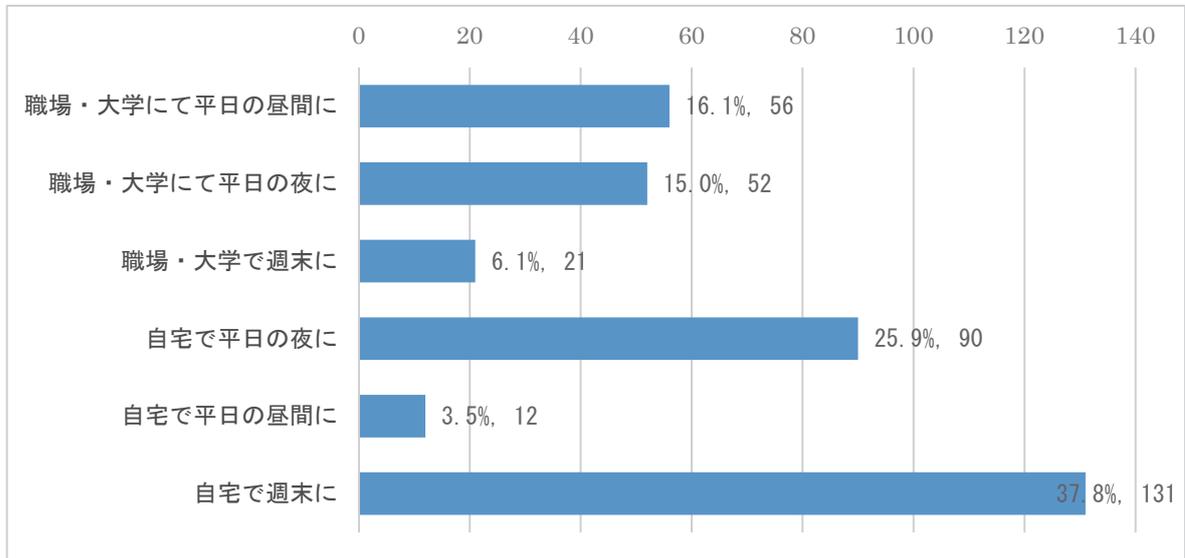
3. ライブ放送はどこで受講しましたか。



自宅(のみ)での受講者は、25% (19年) → 39% (20年) → 33% (21年) → 31% (今年) と20年度をピークに減少してきている。

4. 再放送の受講場所について

再放送を受講された方にお尋ねします。再放送を受講したのは主にどこで・いつ頃だったでしょうか。(複数回答可)

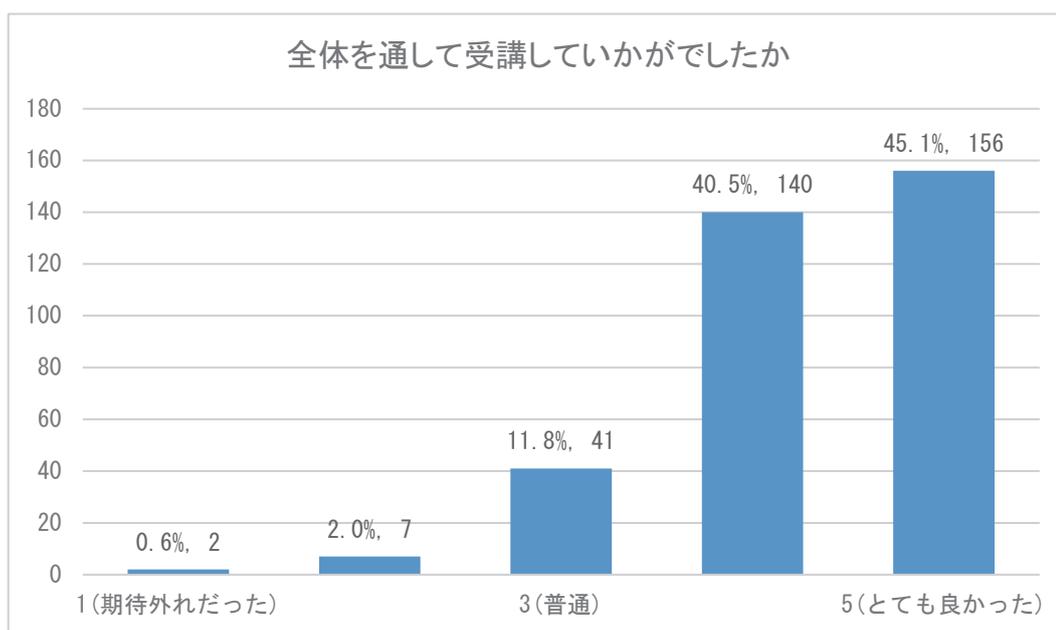


平日受講者 : 57.0% (16.1+15.0+25.9)

週末受講者 : 43.9% (6.1+37.8)

5. 講義全体の感想について

- ・ 日本は国家として科学研究に対する出資が非常に少ないと考えられています。このような中で、このプロジェクトは無料で一流の講師のお話が聞ける極めて貴重なものだと思います。あちこちの他のプロジェクトがすぐ予算不足で切られるという残念な結果を聞きますが、神戸大のこのプロジェクトが益々発展されることを祈念しております。
- ・ 今年から文字起こしが利用できるようになったことが大変よかったです。ありがとうございます。
- ・ 登録したはずなのにメールが来ないこと、登録していないのにメールが来ることがよくあります。
- ・ 全体を通して導入部分はかなり優しいところから始めて欲しい
- ・ 当日の質問は所属と名前を読み上げない方が良いのではないかと思います。
- ・ 可能であれば、気づいたのに遅くて参加・聴講できていなかった前半の部分を見る機会が得られるとありがたいです。
- ・ 書面での Q&A もあり丁寧な対応がなされていると考えますので、90 分の時間内で終わってくださいますと幸いです。
- ・ 時間は内容によって幅を持たせてよいと思います。先生が準備された内容を全てじっくりと聞きたかったです、特に後半で省略したり駆け足になった部分です。
- ・ できれば、講義の映像を2週間遅れくらいで一般にも公開してほしい。同僚に薦める場合は、すべての講義の受講ではなく、トピック毎に面白いのがあるよ、と教えることになると思います。その時に、教えてすぐに見られるほうが、教えるほうも話題の面白さをおぼえていると思います。
- ・ 毎年大変楽しみにしております。勉強したいと考えていた内容だけでなく、普段触れない分野の先生のご講演も拝聴できる非常に貴重な機会となっております。有難うございます。



アーカイブ公開

公開許可のある講義のみ、共催の理化学研究所計算科学研究センターのホームページ eラーニングアーカイブ (<https://www.r-ccs.riken.jp/about/careers/e-learning/intro-com-life-sci/>) にて公開。

計算生命科学の基礎9 ゲノム・トランスクリプトーム解析

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。

計算生命科学の基礎9 (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 ウェブサイト) [□](#)

YouTubeリンク「ゲノム・トランスクリプトーム解析」① [□](#)

YouTubeリンク「ゲノム・トランスクリプトーム解析」② [□](#)

YouTubeリンク「ゲノム・トランスクリプトーム解析」③ [□](#)



計算生命科学の基礎9 (2022)



2022年10月5日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 ゲノム・トランスクリプトーム解析](#)

2022年10月19日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 タンパク質の立体構造予測—AlphaFold以前と以後—](#)

2022年10月26日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 Webを用いた生体高分子の立体構造モデリング](#)

2022年11月2日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 「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」](#)

2022年11月9日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 QM/MMによる酵素反応解析](#)

2022年11月16日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 生体膜・脂質膜の分子シミュレーション](#)

2022年11月22日

レベル2

[計算生命科学の基礎9 インシリコ創薬の基礎と応用](#)



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
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
重田 育照	筑波大学計算科学研究センター 教授
篠田 渉	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科学分野、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** 初學者向け
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例を中心に述べる。

10.12 [水] **ウイルスの進化ゲノム解析** 初學者向け
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配列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に関する最新の研究について講義する。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-** 初學者向け
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らく行われてきた。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** 初學者向け
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法(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、鋳型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** 初學者向け
鯉野 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の応用について事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、生体内で起こ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なってきた。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、生体内で起こ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** 初學者向け
篠田 渉(岡山大学 異分野基礎科学研究所 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、定量化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** 初學者向け
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、その機能を失わせる。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た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(京都大学医学生物学研究所 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、文献的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] **ヒトの行動動向の理解のための数理的アプローチ** 初學者向け
田中 紗織(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** 初學者向け
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線結晶解析の実験と、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COII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、解釈性が高い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釈を可能にする、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 -** 初學者向け
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、必然的に、人工意識の開発をとおしてアナリシス・バイ・シンスシスの意識の自然則を求めることになるが、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。

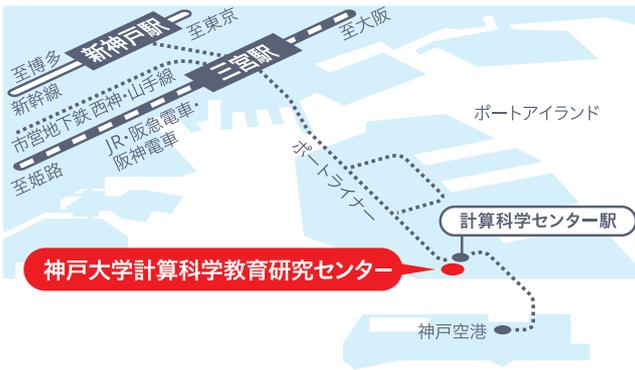
アーカイブサイト 公開中
過去の講義を視聴できます

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。
http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science/9/

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
ls-jimu@eccse.kobe-u.ac.jp

[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)、河野 秀俊(量子科学技術研究開発機構 量子科学技術研究所 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)、岡島 慶(量子科学技術研究開発機構 量子科学技術研究所 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 量子科学技術研究所 量子生命情報科学チーム チームリーダー)



2023年度
計算生命科学の基礎 10

目的

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。

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

共催、後援、協力

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 ビッグデータ医科学分野、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、公益財団法人都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西 日本薬学会

企画協力：日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

運営体制

▼企画コーディネーター

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)

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 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 義治(慶應義塾大学大学院理工学研究科 特任准教授/神戸大学大学院システム情報学研究科 客員准教授)

八幡 憲明(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)

▼配信・運営担当

臼井 英之（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）

近藤 洋隆（合同会社 VRAIDE／関西大学先端科学技術推進機構）

倉 仁美（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）

開催日程

2023年10月4日～2024年1月31日 毎週水曜日、全15回 17:00-18:30

オンライン配信開催

インターネット会議システムサービス「Zoom」を使用し、任意の場所に在籍する講師の講義を神戸大学の事務局を介して、全国の受講生に配信した。

オンデマンド再放送

講義翌日の木曜日16時から翌週火曜日24時までの5日間半に拡充して公開

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（G-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・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）

第1編 生命科学のためのデータサイエンスの基礎
<p>[参考図書]</p> <p>講義 1.1</p> <ul style="list-style-type: none"> ・中井謙太 「新しいゲノムの教科書 DNA から探る最新・生命科学入門」講談社ブルーバックス (2023) <p>講義 1.2</p> <ul style="list-style-type: none"> ・(1)タンパク質の立体構造入門 講談社 ・(2)よくわかるバイオインフォマティクス入門 講談社 <p>講義 1.3</p> <ul style="list-style-type: none"> ・パターン認識と機械学習, Christopher M. Bishop 著, 丸善出版 ・Python で実践 生命科学データの機械学習, 清水 秀幸 編, 羊土社 <p>講義 1.4</p> <ul style="list-style-type: none"> ・羊土社 実験医学増刊 (2022) Vol. 40-No. 12 (2022増刊) セントラルドグマの新常識 (田口英樹他編) ・東京化学同人 現代科学増刊 46 (2020) 相分離生物学の全貌 白木賢太郎 (編) <p>講義 1.5</p> <ul style="list-style-type: none"> ・スパコン・クラウドを生命科学に使う. 実験医学 40(6), 2022 ・C-CAT: The National Datacenter for Cancer Genomic Medicine in Japan. Cancer Discov. 12(11), 2509-2515, 2022
1.1 「ゲノムインフォマティクスの基礎」 (担当: 中井 謙太)
<p>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で、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ではあるが、紹介したい。</p>
1.2 「タンパク質の機能の進化とその情報解析」 (担当: 藤 博幸)
<p>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。</p>
1.3 「創薬のための機械学習」 (担当: 鎌田 真由美)
<p>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、創薬における応用事例について紹介する。</p>

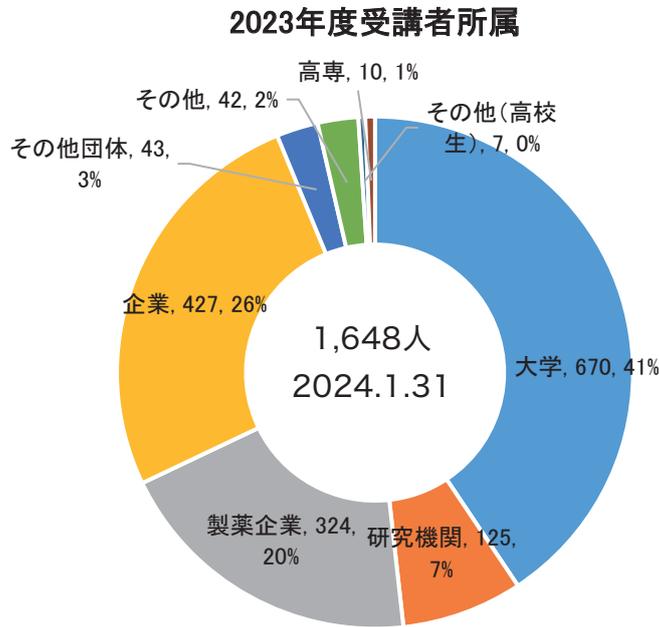
<p>1.4 「天然変性領域を標的とした論理的創薬」 (担当：廣明 秀一)</p> <p>ゲノム解読が進展するにつれ、ヒトゲノムや多くの病原体(細菌・ウイルス)の中から、コンパクトな立体構造を持たないアミノ酸配列をコードした遺伝子・領域が多数発見された。天然変性領域(intrinsically disordered region: IDR)と呼ばれるそれは、しかし、アミロイド形成や細胞内液液相分離と関わりが深く、創薬標的としても注目を集めつつある。本講義では IDR 解析に強みがある溶液 NMR 法の基礎も含め、「鍵と鍵穴」スキームから外れた標的に対する論理的創薬の可能性について概観する。</p>
<p>1.5 「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」 (担当：河野 隆志)</p> <p>5 万例以上の進行固形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。</p>
<p>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</p>
<p>[参考図書]</p> <p>講義 2.1</p> <p>奥村久士「分子動力学シミュレーション」講義動画 https://www.youtube.com/watch?v=6B3BE7-iIPk およびそこからリンクされている講義テキスト(注: 動画概要欄に詳細あり)</p> <p>講義 2.5</p> <ul style="list-style-type: none"> ・「光・物質・生命と反応(下)」 垣谷 俊昭【著】丸善出版 ・「計算分子生物学 物質科学からのアプローチ」田中 成典【著】内田老鶴園
<p>2.1 「生体分子動力学シミュレーションの基礎と応用」 (担当：奥村 久士)</p> <p>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。</p>
<p>2.2 「インシリコ創薬の基礎と応用」 (担当：広川 貴次)</p> <p>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。さらに応用事例についても国内外の先行研究をいくつか紹介したい。</p>

<p>2.3 「代謝システムのトランスオミクス解析」 (担当: 黒田 真也)</p> <p>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 についての試みも簡単に紹介する。</p>
<p>2.4 「タンパク質人工設計の基礎」 (担当: 古賀 信康)</p> <p>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。</p>
<p>2.5 「光合成系の理論研究と分子シミュレーション」 (担当: 鬼頭 宏任)</p> <p>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を実現されている。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素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。</p>
<p>第3編 未来をみすえた医療・創薬への応用</p> <p>[参考図書]</p> <p>講義 3.1</p> <ul style="list-style-type: none"> ・黒田知宏 (監) 医療情報システム (現代電子情報通信選書—知識の森) 2012 オーム社 ・黒田知宏 (編) 医療データサイエンス入門 (仮) : 発刊予定 <p>講義 3.2</p> <p>Lodhi, H. and Yamanishi, Y., "Cheminformatics and Advanced Machine Learning Perspectives: Complex Computational Methods and Collaborative Techniques", IGI Global, 2010.</p> <p>講義 3.3</p> <ul style="list-style-type: none"> ・戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 包摂的コミュニティプラットフォームの構築～社会実装に向けた戦略及び研究開発計画～ (令和5年3月16日 内閣府 科学技術・イノベーション推進事務局) https://www8.cao.go.jp/cstp/gaiyo/sip/sip_3/keikaku/03_community.pdf <p>講義 3.4</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Donald H, John AN, Shalini A, John T, Kishimoto T, Allison C. Information technology and electronic health record to improve behavioral health services. Mental Health in a Digital World. Academic Press. UK. 2021Nov12:11-39. <p>講義 3.5</p> <ul style="list-style-type: none"> ・「脳の情報を読み解く BMI が開く未来」川人光男, 朝日選書, ISBN : 4022599693

3.1 「情報技術が変える医療・医学の未来の姿」 (担当：黒田 知宏)
<p>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。</p>
3.2 「AI・ビッグデータ時代の創薬科学」 (担当：山西 芳裕)
<p>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薬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。</p>
3.3 「「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」 (担当：樽林 陽一)
<p>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「自立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。</p>
3.4 「デジタル技術による精神医学の今後の展望と課題」 (担当：岸本 泰士郎)
<p>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。</p>
3.5 「AI を利用した精神疾患の診断、治療、創薬支援」 (担当：川人 光男)
<p>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、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。</p>

受講登録者状況等

2023年度は1,648人（最終）



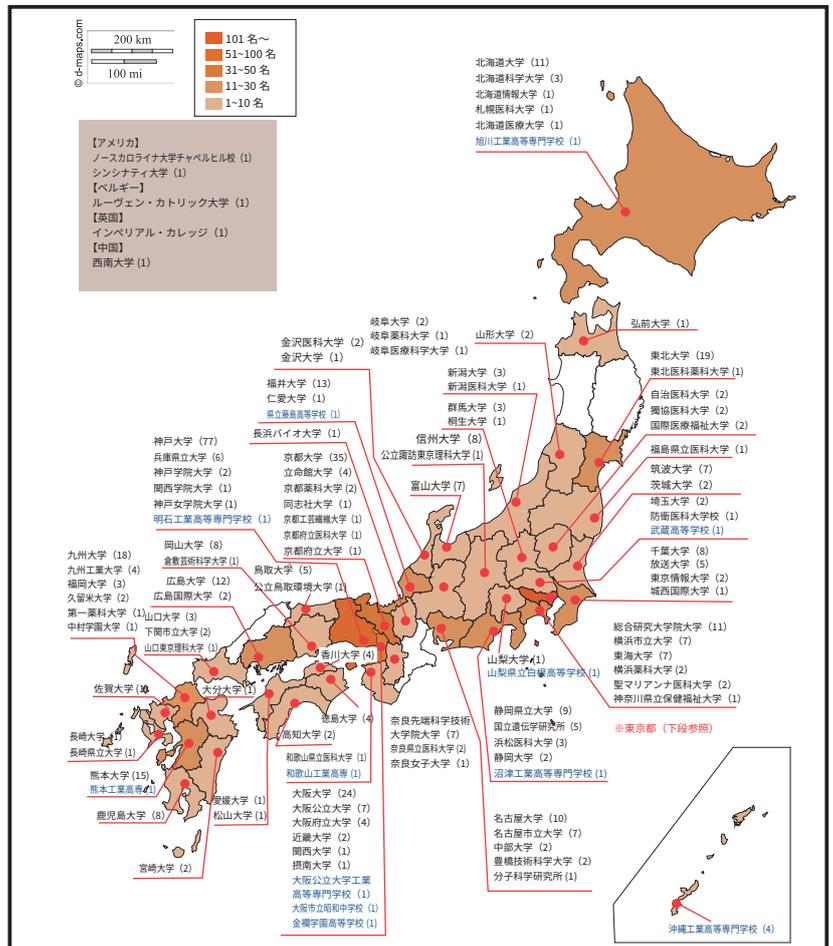
計算生命科学の基礎10
申込登録者所属大学分布

- ・国内139大学 (42都道府県)
- ・海外5大学

合計670名

- ・高専7校、高等学校7校、
17名

東京都からの登録者所属大学
を次頁に記載する。



【東京都】 東京大学 (54) 東京工業大学 (18) 東京医科歯科大学 (15) 順天堂大学 (12) 早稲田大学 (9) 日本大学 (8) 東京理科大学 (7) 北里大学 (6) 東邦大学 (5) 東京農業大学 (5) 慶應義塾大学 (5) 明治薬科大学 (4)	東京農工大学 (4) 国士舘大学 (2) 電気通信大学 (2) お茶の水女子大学 (2) 創価大学 (2) 日本医科大学 (2) 中央大学 (2) 東京都立大学 (2) ヤマザキ動物看護大学 (1) 学習院大学 (1) 東京都市大学 (1) 東京電機大学 (1) 日本歯科大学 (1)	専修大学 (1) 武蔵野大学 (1) 立教大学 (1) 東京薬科大学 (1) 帝京平成大学 (1) 明星大学 (1) 昭和薬科大学 (1) 上智大学 (1) 統計数理研究所 (1) 法政大学 (1) 東京国際工科専門職大学 (1) 東洋大学 (1) 工学院大学 (1)	東京医薬看護専門学校 (1)
--	--	--	----------------

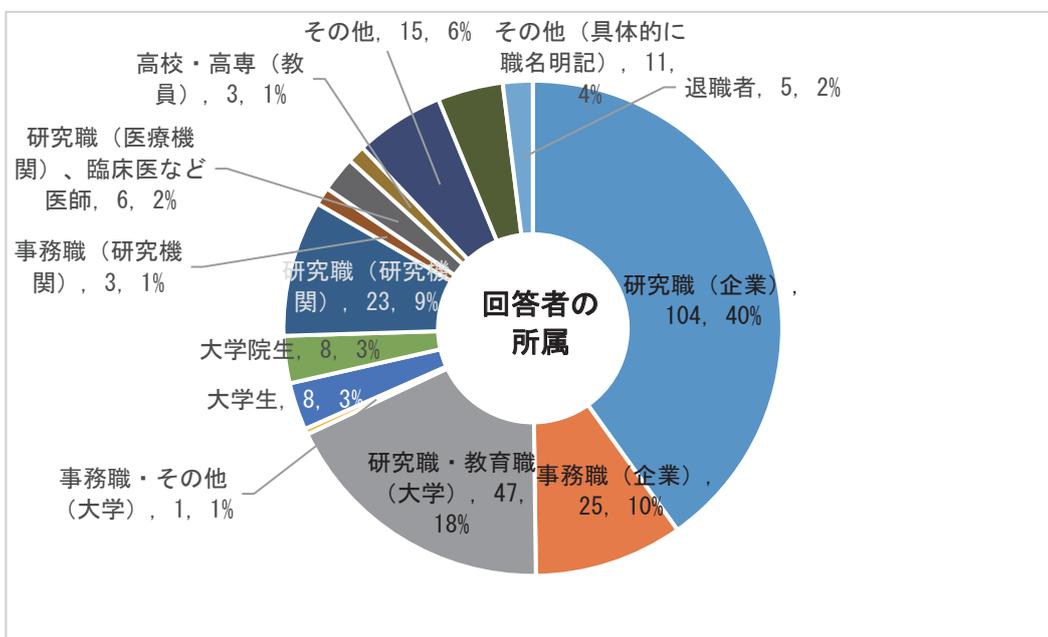
受講者アンケート（講義終了後）

【調査概要】

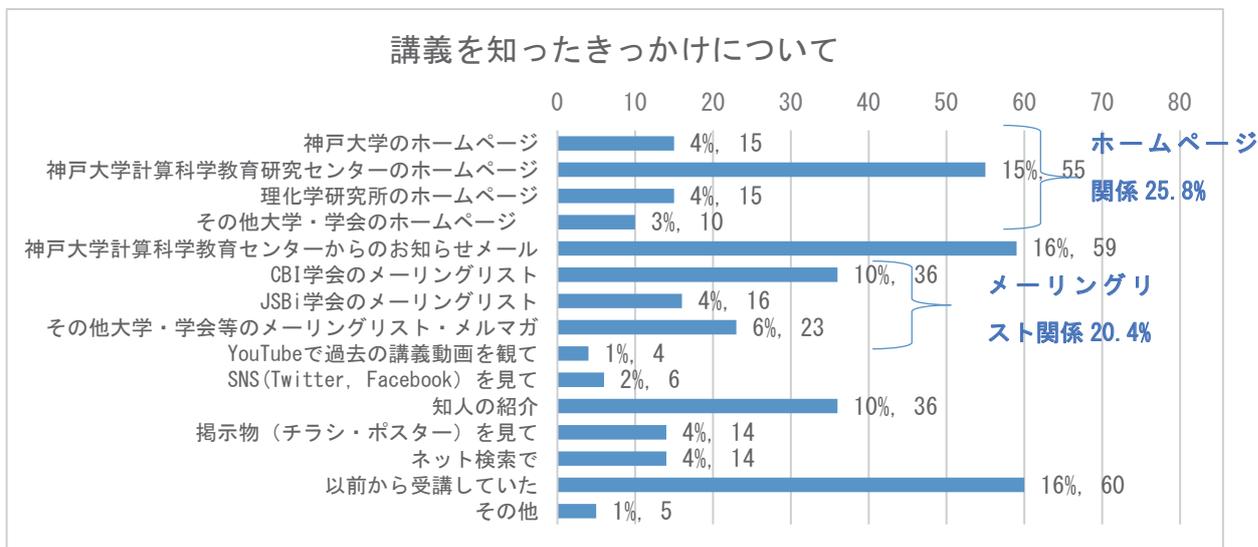
1. 対象 「計算生命科学の基礎10」の受講登録者
2. 標本数 1,648人（2024年1月31日までの受講登録者）
3. 調査方法 メール送信
4. 調査機関 2024年2月2日（金）～2024年2月25日（日）
5. 回収数 259
6. 回収率 約15.7%

【アンケート結果】※アンケート結果の内容を一部抜粋

1. 所属について



2. 講義を知ったきっかけについて

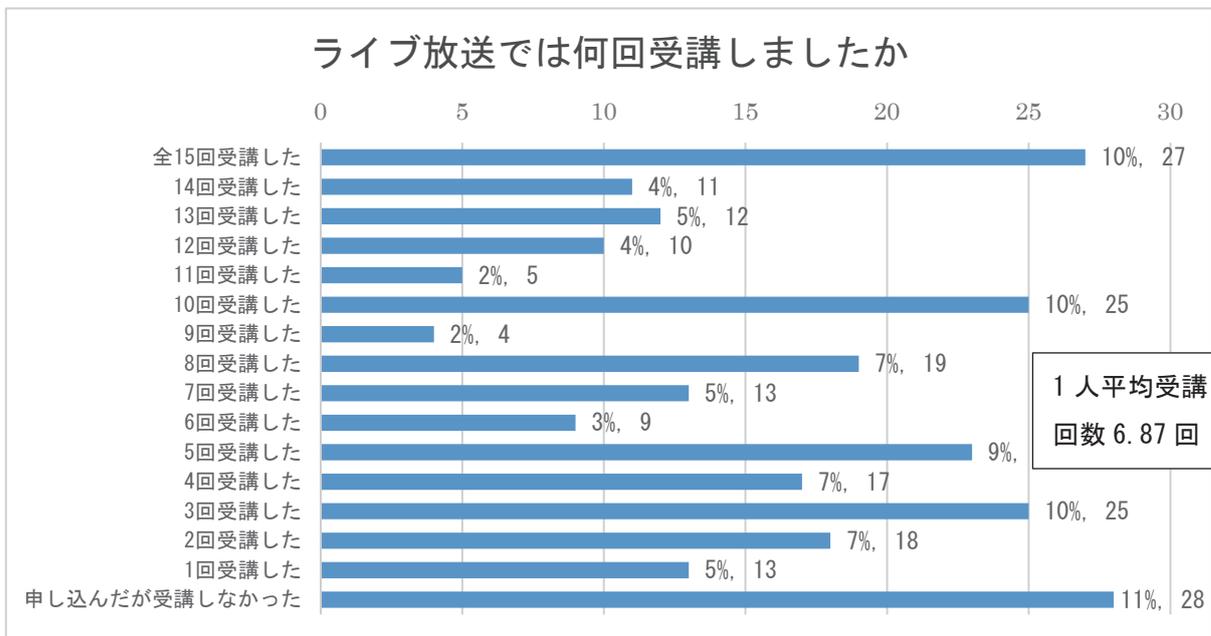


3. 受講回数

- ・ライブ放送の平均受講回数 6.87 回

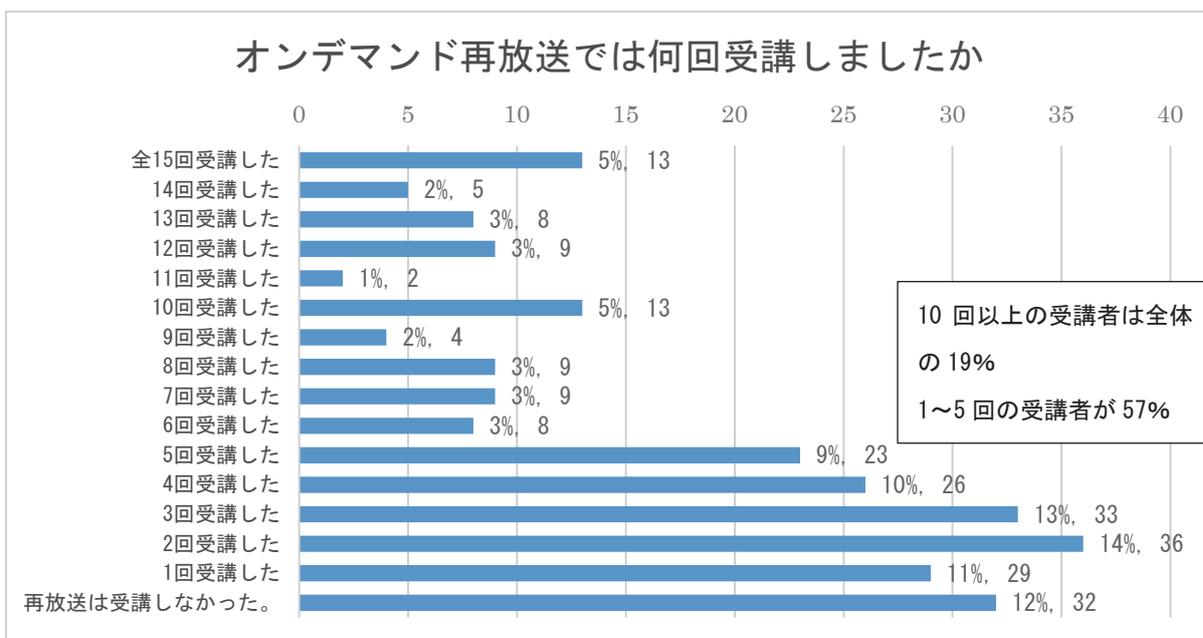
(2020年 9.2回→2021年 7.5回→2022年 6.7回と3年間で減少していたが、23年は微増)

- ・ライブでは受講せずの割合：11% (2022年 9.8%より増加)



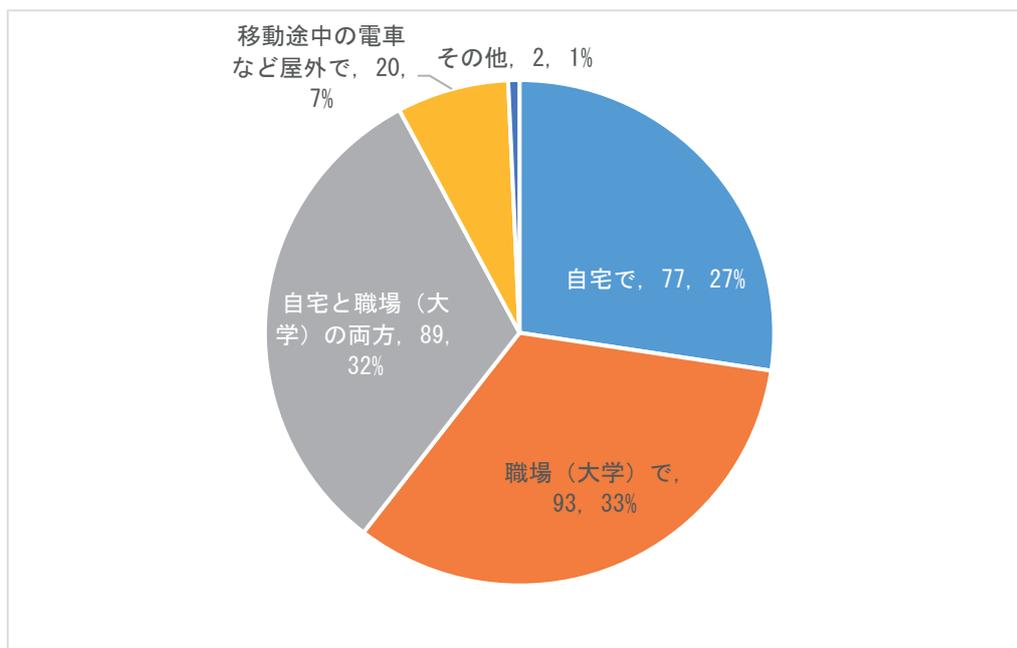
- ・再放送の平均受講回数 4.9 回 (2021年度 3.8回、2022年度 4.0回より増加)

- ・再放送を全く受講せずの割合：12% (2021年度 26%、2022年度 19%より減少)



再放送期間を3日半から6日半に拡大したこともあり、オンデマンド再放送での受講回数が一層増加した。またライブ放送の受講回数も微増している。

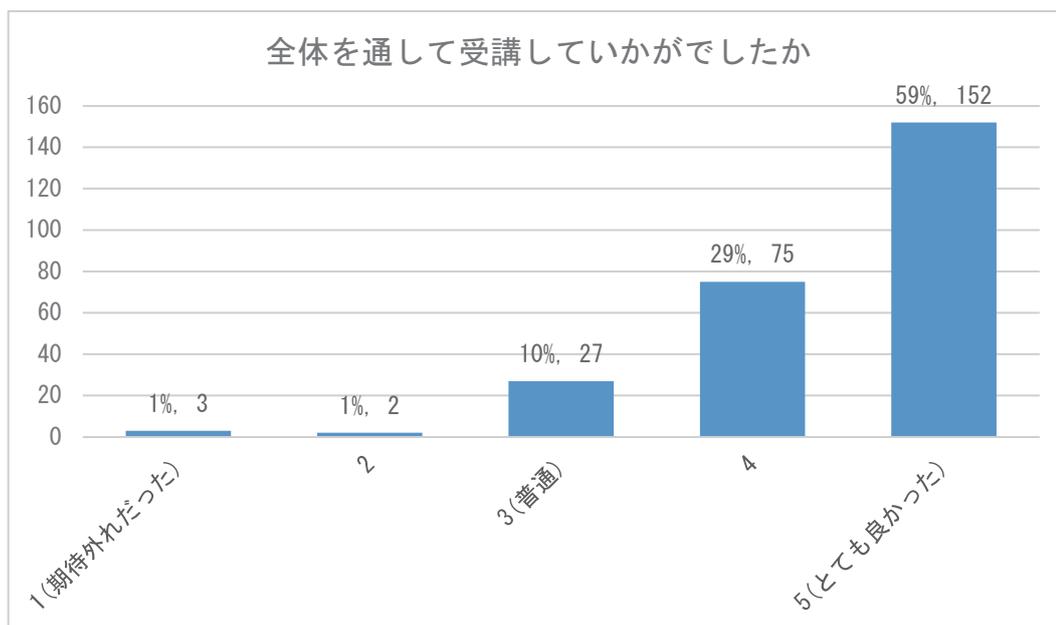
4. ライブ放送はどこで受講しましたか。



自宅（のみ）で受講者は、2020年の39%をピークに年々減少しており、コロナ禍前の25%（2019）に近付いている。

5. 講義全体の感想について

- ・ 自らの知識からすると専門性が高すぎてついていけない回もあった。分野を絞ってステップアップしていける講義だと助かります。
- ・ 最新の研究内容を聴講できる貴重な機会として毎年楽しみにしている講義なので、是非また再開して欲しい。
- ・ 有料化にて再開する際の希望として、バイオインフォマティクスに関する集中講義などがあれば、有料でも参加したいです。実習があればなおよい。
- ・ 毎年楽しみに聴講させていただいております。会社の新人向け資料として活用させていただいておりますが、例えば分野ごとよりベーシックな部分をまとめて動画配信していただくことはできませんでしょうか。時として講義についていけない者もあり、ベーシックな部分は動画で自習し、アドバンスな部分はリアルタイムで聴講する形式が良いかと思いました。
- ・ 有料化については、企業に所属しているうちはある程度までお支払いできると思いますが、あまり高いと（裾野を広げる活動として計算を専門としていない同僚や後輩に）気軽にはお勧めできなくなる点、また、定年退職後に参加させていただきたいとなると厳しくなるかと思いますので、安価にお願いできますと幸いです。
- ・ スポンサーを付けて、無料を維持することは難しいでしょうか
- ・ 生命科学分野のデータサイエンスの「基本の基」や「自分のPCでできるデータの活用法」「活用できる情報、情報のサイトやアプリケーション」等のセミナーを聞いた上で「自分でやってみる、あるいは、試すこと」のできるリンクなどを作っただけだと嬉しいです。
- ・ 大人の学びなおし、という言葉も聞きますが、このような専門的で横断的な内容をまとめて聞くことができるのは、計算生命科学の基礎の講義以外に見当たりません。特に生命科学分野では、教科書が書き換わる発見があることも、他の学問領域に比べれば、ままありますし、そういった観点からも先端の話題を広範に扱う本講義は貴重な存在と思います。
- ・ これまでの運営、大変にお疲れ様でした。ありがとうございました。有料化については、今まで無料であったのが不思議で、社会人にとっては特に問題ないと思います。



アーカイブ公開

公開許可のある講義のみ、共催の理化学研究所計算科学研究センターのホームページ eラーニングアーカイブ (<https://www.r-ccs.riken.jp/about/careers/e-learning/intro-com-life-sci/>) にて公開。

計算生命科学の基礎10 ゲノムインフォマティクスの基礎

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で、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あるが、紹介したい。

計算生命科学の基礎10 (神戸大学大学院システム情報学研究所 計算科学教育研究センターウェブサイト) □

YouTubeリンク「ゲノムインフォマティクスの基礎」① □

YouTubeリンク「ゲノムインフォマティクスの基礎」② □

YouTubeリンク「ゲノムインフォマティクスの基礎」③ □



計算生命科学の基礎10 (2023)

2023年10月4日	レベル2	計算生命科学の基礎10 ゲノムインフォマティクスの基礎
2023年10月11日	レベル2	計算生命科学の基礎10 タンパク質の機能の進化とその情報解析
2023年10月18日	レベル2	計算生命科学の基礎10 創薬のための機械学習
2023年10月25日	レベル2	計算生命科学の基礎10 天然変性領域を標的とした論理的創薬
2023年11月1日	レベル2	計算生命科学の基礎10 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
2023年11月8日	レベル2	



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

プログラム詳細はこちら!

登録受付中

計算生命

検索



オンライン
受講

聴講無料

事前登録制

[遠隔インタラクティブ講義]

融合するAI、データサイエンス、生命科学、そして次の10年をみずえて

計算生命科学の基礎10

2023
10.4 WED → **1.31** WED
2024

[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

[講義スケジュール]

第1編 生命科学のためのデータサイエンスの基礎

- 10.4 **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)
- 10.11 **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)
- 10.18 **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)
- 10.25 **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)
- 11.1 **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)

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

- 11.8 **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)
- 11.17 **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)

- 11.22 **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)
- 11.29 **タンパク質人工設計の基礎**
古賀 信康 (大阪大学蛋白質研究所 教授)
- 12.6 **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 准教授)

第3編 未来をみずえた医療、創薬への応用

- 12.13 **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)
- 1.10 **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科学研究科 複雑系科学専攻 生命情報論講座 教授)
- 1.17 **「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**
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)
- 1.24 **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)
- 1.31 **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)

企画協力: 日本バイオインフォマティクス学会、CBI学会

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
ビッグデータ医科学分野、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

過去の講義を視聴できます
アーカイブサイト
公開中



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あるが紹介したい。

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、創薬における応用事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液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)

5万例以上の進行固形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 理論・シミュレーション技術

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。さらに応用事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についての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 信康(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。本講義では、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を実現されている。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科学研究科 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情報・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、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**
榊林 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り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「自立的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る、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みできた。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課題点をまず説明する。脳科学と人工知能を組み合わせ、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。

過去の講義を視聴できます
アーカイブサイト公開中



[コーディネーター] 伊藤 真里(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 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。



コーディネーターコメント

第1編

クライオ電顕によるタンパク質の原子分解能構造解析(2013年)、AlphaFoldによる構造予測(2018年)、Deep Learning(2012年)やTransformer(2017年)による機械学習の革新、そして新型コロナウイルスパンデミック(2019年)。この10年で数多くの“ゲームチェンジャー”が登場しました。統計解析・シミュレーション・機械学習などを統合したデータサイエンスの生命科学研究における重要性は益々高くなり、同時に“実践レベル”の実力を要求される時代になったと思います。この「計算生命科学の基礎」は10年に渡り、この分野の裾野を広げ研究開発レベルを向上することを目指してきましたが、今回で一旦その役目を終えることになりました。この間、高品質の講義を提供頂きました諸先生、10年前はまだそれほど一般的ではなかった遠隔講義の運営にご尽力頂いた方々に感謝申し上げます。10年で一区切りをつけるものの、この10年の生命科学研究の革新が収束するとも思われず、この遠隔講義の“卒業生”の益々のご活躍を祈念します。



白井 剛（長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授）

この講義シリーズには途中から参加しました。計算生命科学は生物学だけでなく、数学、物理、化学、情報科学など多岐にわたる知識が必要です。この分野は年々拡大し、21世紀を生命科学の時代と呼ぶに相応しい中心的な進展を遂げています。毎年の講義ではこの点を踏まえ、基礎を確立しつつも新たな知見を得られるよう、第1編および第2編の講師を選定・依頼してきました。この講義が始まった10年前も、近い将来にビッグデータが出現することは予測されていましたが、実際には予想を大きく上回る進展がありました。生命科学研究において、情報科学は不可欠な要素となっています。今後、ビッグデータの解析を通じて、「生命とは何か」という究極の問いにどこまで迫れるのか、また、それを解明できるのか、非常に興味深いところです。この講義はここで終了しますが、過去10年間の講義が皆さんの理解を助け、生命科学研究の進展

に貢献できればと考えています。



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）

第2編

10年間この「計算生命科学の基礎」の運営に携わってきましたが、昨今 Zoom 等を使つてのセミナーやレクチャーのオンライン配信が普通のこととなり、このシリーズもその役目を終えたかなと思います。本企画を始めるにあたり、手探り状態の遠隔講義を後押ししていただいた理化学研究所の江口先生、土井さん、また神戸大学の賀谷先生には心より感謝申し上げます。ご講義をお願いした100名を超える講師の先生方、また、延べ1万人近くにも及ぶ受講者の皆様方に支えられた10年間だったと思います。計算生命科学に関わる学術の流れとしては、AlphaFold2 や ChatGPT に代表される人工知能・機械学習技術の進展、京や富岳などのスーパーコンピュータの発展、クライオ電顕やXFEL などによる生体分子構造解析の進歩などの技術革新が顕著でした。何より、2020年からのコロナ禍は図らずも計算生命科学の鼎の軽重を問うことになり、ワクチンや経口薬の開発に計算科学・データサイエンスが重要な役割を演じたことで、生命科学におけるインシリコ技術の欠かせない位置づけは決定的なものとなりました。2025年には大阪で「いのち輝く未来社会のデザイン」をテーマとした万博が開催されますが、こういった国家的イベントも契機となって、今後も生命科学や医療・創薬と計算科学の結びつきはより強固となっていくことでしょう。



田中 成典（神戸大学大学院システム情報学研究科 教授）

生命現象を理解するために、コンピュータを利用した様々な方法が普及してきており使用されています。研究開発現場では利用されつつも、そのような方法についての原理の理解は多くの場合難しいものです。

このようなことから本遠隔講義においては、バイオインフォマティクスや分子シミュレーションを専門とする先生方に、その基本となる原理からご講義いただくことといたしました。



また同時にそれぞれの先生方の最近の研究内容を盛り込んでいただいたことにより、それぞれの方法が具体的なものとして聴講された皆様にご理解いただくことができたのではないかと思います。

本遠隔講義の内容が知的好奇心を満たし、研究においても役立つものとなっていれば幸いです。

森 義治（慶應義塾大学量子コンピューティングセンター 特任准教授）

第3編

この講義シリーズにコーディネーターとして携わるようになったのは2020年からです。主に脳神経科学研究から得られた知見の社会実装の場面でAI／機械学習技術が果たせる役割について、エキスパートの先生方にご講義をお願いして参りました。2023年度も、精神医学分野において顕著な活躍をされている先生お二人にご講義をお願いすることができ、本講義シリーズの最後を締めくくるにふさわしいお話をいただけたと思います。本遠隔講義の内容が、聴講された皆様方の知的好奇心を刺激し、普段の勉学や研究活動においてお役に立てる所があったならば幸いです。



八幡 憲明（量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命科学チーム チームリーダー）

私が携わったのは最後の3年間だけでしたが、この10年は計算技術・AI・機械学習が大きく発展し、世界が変化した時代であったと思います。その経過を目の前にしつつ、自分も「計算生命科学の基礎」の1企画者・1聴講者として分野をリードする講師の方々から多くを学びました。私個人の研究においても、心の中に思い描いた映像を脳信号から可視化する技術を開発しましたが、これも本講義シリーズの2021年、2022年の講義がきっかけでした。本講義シリーズの最終年度の副題「次の10年をみすえて」は私が提案したものになります。次の10年、高齢化がより厳しくなり、日本はこのまま失落すると誰もが思っています。この講義シリーズを聞いた方々から、次の10年を変える研究・技術・政策・草の根の活動が生まれ、また、さらに次の10年をみすえて、本講義のような素晴らしい講義シリーズが企画され続けていくことを望みます。これを読んだ方、ぜひ挑戦してください！



間島慶（量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 量子生命科学チーム 研究員）

「計算生命科学の基礎」の応用編（第3編）の担当をさせて頂き、AIの創薬・医療への応用、社会実装に向けた課題に焦点をあて、毎年、多くのトップランナーの先生がたから素晴らしいご講義をいただきました。受講者の皆様からも活発な質疑応答をいただき、楽しく心躍る時間を頂きました。科学は技術の進歩とともに発展し、そして、その社会実装とともに成長すると常から思っています。この10回の本講義の歴史の中にも、その技術の進歩とともに歩んで成長してきた計算生命科学を振り返ることができます。我が国が、私たちが前進することを恐れず、例えば緻密な医療現場のデータを活かすことが出来てくれば、この類まれな国民皆保険と手厚い医療をすすめる我が国が、健康長寿に向けての世界トップのビッグデータ AI 活用国となれることは間違いありません。最後に並々ならぬ熱意を持って本講義シリーズを開始くださり、そして継続して下さった関係者の皆様、そして支えて下さったご聴講者の皆様に心から感謝致します。そして、これからも、AI技術とデータサイエンス、計算科学の融合領域の橋渡しができるように、何らかの形で、また皆様方と心躍る時間を過ごせることを心から願っています。



伊藤 眞里（大阪大学大学院薬学研究科 特任教授
／医薬基盤・健康・栄養研究所 客員研究員）

編集・発行



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

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1番48

Email: office@eccse.kobe-u.ac.jp (センター代表)

ls-jimu@eccse.kobe-u.ac.jp (講義運営担当)

<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp>



2024年3月