

第3編 医療・創薬における計算生命科学

3.4

創薬における計算生命科学：
インフォマティクスとシミュレーションを
融合したインシリコスクリーニング

本間光貴 (理化学研究所 ライフサイエンス技術基盤研究センター チームリーダー)

近年の創薬において、タンパク質-リガンド間のドッキングによるインシリコスクリーニングは無くてはならないものとなっている。一方、適切なドッキングを行うためには、タンパク質構造の自由度の考慮、精度の良い結合親和性評価に加えて、計算のスピードとのバランスも重要である。これらのポイントのそれぞれの最近の動向を説明するとともに、具体的な創薬事例について紹介する。

<次回の予定>

2016/2/3 3.5 大規模計測と大規模計算の時代の脳科学

(銅谷賢治 沖縄科学技術大学院大学学園 神経計算ユニット 教授)

開催日時：2016年1月27日(水) 17:00 - 18:30

【申し込み方法】

参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

神戸大学計算科学教育センターのホームページから開催日前日までに

お申し込みください。詳しくはホームページをご覧ください。

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

お申込み先 http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/entry/distance_learning/?id=674

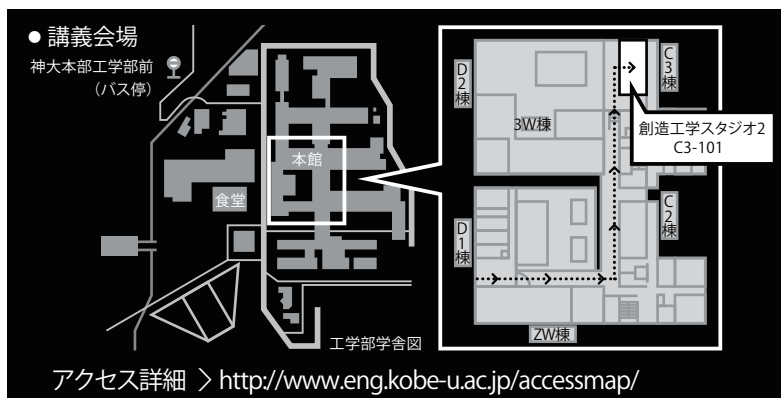
★神戸大学会場受講の場合

申し込みなしでも当日参加可能です。直接会場にお越しください。

会場では講師に直接質問が可能です。

【会場】

神戸大学工学部学舎 1階 C3-101 (創造工学スタジオ2)



<講義スケジュール>

第1編 ゲノムから見る生命科学

- 1.1 ヒトの病気はヒトの研究で～生命情報の統合によるヒト生物学と先制医療 (2015/10/14)
- 1.2 生物システムの設計：システム生物学から合成生物学へ (2015/10/21)
- 1.3 遺伝子ネットワーク解析：細胞の状態変化の過程を探る (2015/10/28)
- 1.4 到来する大規模生命情報の解析に備えて (2015/11/4)

第2編 タンパク質からみる生命科学

- 2.1 計算生命科学のための量子化学基礎 (2015/11/11)
- 2.2 タンパク質の量子化学計算 (2015/11/18)
- 2.3 分子動力学計算によるタンパク質の機能解析 (2015/11/25)
- 2.4 分子動力学計算を活用したインシリコ創薬 (2015/12/2)
- 2.5 QM/MM シミュレーションによるタンパク質機能解析 (2015/12/9)

第3編 医療・創薬における計算生命科学

- 3.1 製薬企業におけるデータ駆動型の研究開発 (2015/12/16)
- 3.2 フラグメント分子軌道法によるタンパク質-リガンド相互作用の高精度解析と創薬への応用 (2016/1/13)
- 3.3 創薬と医療のためのシミュレーション科学とビッグデータ科学 (2016/1/20)
- 3.4 創薬における計算生命科学：インフォマティクスとシミュレーションを融合したインシリコスクリーニング (2016/1/27)
- 3.5 大規模計測と大規模計算の時代の脳科学 (2016/2/3)

詳しくはホームページでご確認ください。

主催：神戸大学計算科学教育センター

共催：神戸大学連携創造本部、理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、産業技術総合研究所 HPCI 戦略プログラム分野1 人材養成プログラム、理化学研究所 計算科学研究機構

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、公益財団法人計算科学振興財団