

遠隔インタラクティブ講義

計算生命科学の基礎IV

計算科学と生命科学の融合

基礎から医療・創薬・人工知能への応用まで

はじめに～計算生命科学の概要

鶴田 宏樹

神戸大学 准教授

学術・産業イノベーション創造本部

社会実装デザイン部門 構造科学産学連携推進室 室長

工学研究科 道場「未来社会創造研究会」師範

減災デザインセンター 副センター長

先端融合研究環 未来世紀都市学研究ユニット

数理データサイエンスセンター 産学連携・地域連携部門(予定)

理化学研究所Spring-8 客員研究員

本日の講義内容

- 「計算生命科学の基礎」について
- 計算生命科学とは
- 計算生命科学のインパクト
- 計算生命科学と将来
- シラバス紹介

講義の目的

- 生命科学の近年の急速な進歩は計算機科学、統計学、シミュレーション科学等によって大きく支えられてる。
- 生命科学と理工学の学際的研究領域である「計算生命科学」の基礎と展望を学ぶ機会を全国に提供
- 「計算生命科学」を基盤として社会変革をもたらす人材の育成を目指す

講義内容の範囲

- 遺伝子情報～医療応用まで
- 情報科学、シミュレーション科学、人工知能技術

受講者対象(レベル)

計算生命科学に興味をお持ちの方全て

大学院生～企業・アカデミアの研究者 (高校生・大学生、一般)

チーム「計算生命科学の基礎」

企画・コーディネート担当

- ◆ 白井 剛 (長浜バイオ大学 バイオサイエンス学部)
- ◆ 江口 至洋 (神戸大学 学術・産業イノベーション創造本部)
- ◆ 田中 成典 (神戸大学大学院 システム情報学研究科)
- ◆ 森 一郎 (神戸大学大学院 科学技術イノベーション研究科)
- ◆ 鶴田 宏樹 (神戸大学 学術・産業イノベーション創造本部／工学研究科)



講義配信担当

- ◆ 渡邊 博文 (神戸大学 計算科学教育センター)
- ◆ 鈴木 洋介 (神戸大学 計算科学教育センター)

講義運営担当

- ◆ 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)
- ◆ 石野麻由子 (神戸大学 計算科学教育センター)
- ◆ 土井 陽子 (理化学研究所 生命システム研究センター)

共催: 神戸大学計算科学教育センター、神戸大学学術・産業イノベーション創造本部、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、理化学研究所生命システム研究センター ポスト「京」重点課題1、産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター、理化学研究所計算科学研究機構、公益財団法人計算科学振興財団

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

企画協力: CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

講義の情報とアーカイブ

神戸大学 計算科学教育センター「遠隔講義」のページへ

http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science4/

遠隔講義

TOP > 遠隔講義 > 計算生命科学の基礎IV

計算生命科学の基礎IV

計算科学と生命科学の融合：基礎から医療・創薬・人工知能への応用まで[全15回]

生命科学の研究分野は、計算機科学・シミュレーション科学・統計学・構造科学などの発展に連動して研究領域の拡大と深化を遂げています。その急速な発展は農学や医学、健康関連分野に大きな影響を及ぼし、また知識の融合を促し研究分野のパラダイムシフトを現実のものにしています。その原動力となっているものの一つが、コンピュータを活用する計算生命科学です。計算生命科学はDNAに刻み込まれたゲノム情報、タンパク質の構造情報、ヒトレベルでの健康・疾患情報などを含むビッグデータを解析・システム統合し、シミュレーションでの予測によって生命を理解し、医療分野への応用の基盤となる学際領域です。今後、データサイエンスやAI技術などの新たな科学領域や技術と組み合わせ、次世代技術・知識が創生される舞台となります。このプログラムは、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、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お持ちの様々な方々に、その基礎と今後の展望を学んでいただき、様々な分野で基礎から応用までの研究開発を支える人材の育成を目指しています。

【受講予定者のみなさまへ】 WebEX接続方法および受講にあたっての注意事項を掲載しましたのでご覧ください！

遠隔講義のご案内



シミュレーション スクール・ セミナーのご案内



π -computer バイ・コンピュータ



π -VizStudio バイ・ビズスタジオ



π -CAVE バイ・ケイブ



日程	2017/10/4 (水) ~2018/1/24 (水) 毎週水曜日 17:00~18:30
場所	配信会場： <u>神戸大学計算科学教育センター セミナー室208 (神戸大学統合研究拠点2階)</u> 講師へ直接質問できる機会もございますので、ぜひ会場でもご受講ください！ (定員30名) 会場以外からは、WebEX (インターネット) による受講が可能です。事務局からの招待状メールの指示に従って、PC・モバイルから記載URLにログインするだけで、どこからでも参加可能です。
対象者	大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者
担当講師	鶴田宏樹 (神戸大学学術・産業イノベーション創造本部/工学研究科 准教授)



講義の情報とアーカイブ

講義内容

はじめに 計算生命科学の概要 (担当: 森 一郎) 《10月4日(火)》 [講義資料](#) [配信後のご質問](#)

[→アーカイブ動画](#)

生物学、医学、薬学、農学等の生命科学の研究は、急速に進歩しつつあるコンピュータや IT 技術、情報科学との融合により、計算生命科学という学際的な領域を築きつつある。ビッグデータ解析技術、そして人工知能研究の進展がさらにその流れを加速している。本講義では、核酸やタンパク質の分子レベルの基礎研究から医療・創薬への応用までの例を取り上げながら、講義全体の導入紹介を行う。

第1編 バイオインフォマティクス

[参考図書]

1. 藤 博幸「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」講談社

[計算生命科学の基礎III](#)
[\(→終了しました\)](#)

2016/10/4 (火) ~
2017/1/24 (火) 毎週火
曜日 17:00~18:30

こちらでも参加可能です。

会場: [神戸大学計算科学教育センター セミナー室208 \(神戸大学統合研究拠点2階\)](#)

会場は定員30名です。講師へ直接質問できる機会もございますので、ぜひ会場でもご受講ください!

会場以外からはWebEX (インターネット) による受講が可能です。事務局からの招待状メールの指示に従って、PC・モバイルから記載URLにログインするだけで、どこからでも参加可能です)

講義の情報とアーカイブ

一般の方 | 研究者・学生の方 | 企業の方 | 報道関係の方 | お問い合わせ | アクセス

RIKEN AICS 理化学研究所 計算科学研究機構
RIKEN Advanced Institute for Computational Science

Facebookを見る · English | サイト内検索

トップ | 計算科学研究機構とは | 研究成果 | 京について | ポスト京について | 将来への取り組み | イベント・広報 | もっと知りたい

Learn more
- もっと知りたい

トップ > もっと知りたい > eラーニングアーカイブ > 講義 (コースから探す方へ) > 計算生命科学の基礎 (2016) > 計算生命科学の基礎Ⅲ 計算生命科学の概要①～②

よくある質問

コンピュータ・シミュレーションでできること・わかること

スパコンのことば

スパコン豆知識

ハロー！スパコン

AICS テクニカル・レポート

eラーニングアーカイブ

お問い合わせ

報道関係者の方へ

アクセス

「京」の見学について

展示エリア案内

計算生命科学の基礎Ⅲ 計算生命科学の概要①～②

[2016年10月04日]

生物学、医学・薬学、農学等の生命科学の研究は、急速に進歩しつつあるコンピュータや IT 技術、情報科学との融合により、計算生命科学という学際的な領域を築きつつある。ビッグデータ解析技術、そして人工知能研究の進展がさらにその流れを加速している。本講義では、核酸やタンパク質の分子レベルの基礎研究から医療・創薬への応用までの例を取り上げながら、講義全体の導入紹介を行う。

http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science3

1 2

計算生命科学の基礎Ⅲ 計算生命科学の概要① 遠隔インタラクティブ授業
計算生命科学の基礎Ⅲ
生命科学と理工学の融合による生命理解と医療・創薬への応用
はじめに (2016年10月4日)
計算生命科学の概要①
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

主催: 神戸大学計算科学研究センター
共編: 神戸大学連携創薬本部 理化学研究所生命システム研究センター ポスト「京」重点課題(1)、産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター、理化学研究所計算科学研究機構、公益財団法人計算科学振興財団
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
企画協力: CBI学会、日本バイオインフォマティクス学会

本日の講義内容

- 「計算生命科学の基礎」について
- 計算生命科学とは
- 計算生命科学のインパクト
- 計算生命科学と将来
- シラバス紹介

「計算生命科学」とは?? 生命科学 x 計算科学?

生命科学 = 「主に観察と実験に基盤を置いた学問領域」

生命現象と生物学を中心に化学・物理学等の基本的側面と医学・薬学・農学・工学・心理学等の応用的側面から総合的に理解しようとする学問

ジャック・モノー

1965年にノーベル生理学・医学賞を受賞

実験研究者であり、直観よりも論理的思考を重視

“立派な理論に支えられていない実験なんか、
決して信じてはいけないよ“

計算科学 = 理論と実験が協調的に進められる中間点

「理論に基づく計算を行い、実験を支える。実験から得られるデータを計算し、解析し、理論を構築する。」

計算生命科学は、スーパーコンピュータを積極的に活用することにより、革新的な計測技術から生み出されるヘテロなビッグ・データを効率的に解析し、動的な多階層システムを統合的につなぎ、生命システムを総体として理解することを目的としています。

この結果、生命科学ははじめて**予測可能性**と**制御可能性**を獲得することが出来るのです。

理化学研究所 HPCI戦略プログラム分野1 WEBページより抜粋 <http://www.scls.riken.jp/research/>

HPCI戦略プログラムは2016年3月31日に終了

→ フラッグシップ2020プロジェクト(ポスト「京」開発プロジェクト)における計算生命科学分野(重点課題1と重点課題2)の研究開発に期待

「計算生命科学」とは?? 生命科学 x 計算科学?

知の融合による学術分野の発展

古典的生命科学

化学・物理

医学・薬学・農学・工学・心理学

構造生命科学

タンパク質化学

結晶学

放射光科学

計算生命科学

計算機科学

統計学

シミュレーション科学

進化的生命科学

医学・薬学・農業・工業などの実用化への貢献

「計算生命科学」のさらなる進化

3つの要因

計算機の進歩

京 → ポスト「京」

ビッグデータ

計算技術の進歩



「計算生命科学」は……

理学、工学、生物学などの枠を超えた協力関係でさらに進化

この講義は実験生命科学 及び 広く理工系の方々を対象

生命科学を志す皆さんには、

意識するとしないにかかわらず、研究室にある実験・計測装置から生み出される大量のデータや、世界的に公開されている膨大な生命科学データベースを基盤に研究を進めることが求められてくると思います。

理学、工学を志す皆さんには、

その基礎的な理論を生命科学に生かしていく場がますます広がってきているとともに、生命科学の方々から連携を強く求められてくると思います。

この講義により理学、工学、生物学などの枠を超えて、「理論、計算、観察・実験の協力関係がより一層深まって行くことを願っています。」

本日の講義内容

- 「計算生命科学の基礎」について
- 計算生命科学とは
- 計算生命科学のインパクト
- 計算生命科学と将来
- シラバス紹介

計算生命科学をノーベル賞に見る

- ◆ 1963年ノーベル生理学・医学賞：「神経細胞膜の末梢および中枢部分における興奮と抑制に関するイオン機構の発見」(A.L. Hodgkin, A.F. Huxley)；膜の電気回路モデルの提案
- ◆ 2011年ノーベル生理学・医学賞：「自然免疫の活性化に関する発見」(B. Beutler, J.A. Hoffmann)；配列データベース、相同性検索ソフトの活用
- ◆ 2012年ノーベル生理学・医学賞：「成熟した細胞に対してリプログラミングにより多能性(分化万能性)を持たせられることの発見」(J. Gurdon, S. Yamanaka)；遺伝子発現データベース・解析プログラムの活用
- ◆ 2013年ノーベル化学賞：「複雑な化学系のためのマルチスケールモデルの開発」

2013年のノーベル化学賞は計算生命科学に

The Nobel Prize in Chemistry 2013



Photo: A. Mahmoud
Martin Karplus
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
Michael Levitt
Prize share: 1/3

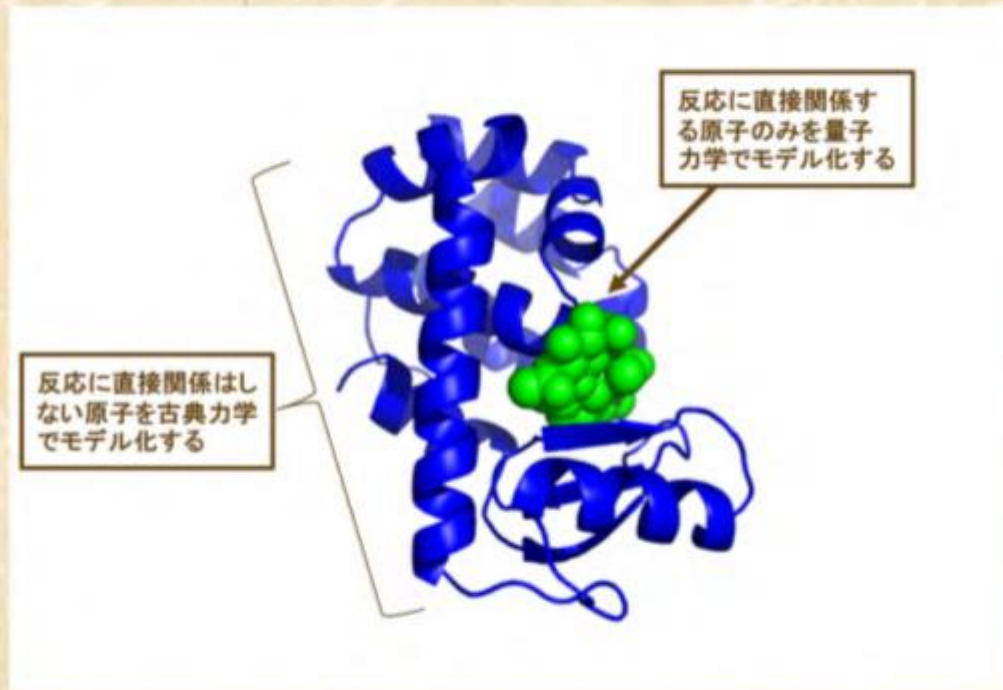


Photo: A. Mahmoud
Arieh Warshel
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Chemistry 2013 was awarded jointly to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel *"for the development of multiscale models for complex chemical systems"*.

2013年のノーベル化学賞は計算生命科学に

古典力学と量子力学を統合した研究
「複雑な化学システムのためのマルチスケール・モデル」



PDB:148Iを用いて作成した。

29

イメージ図：青色は酵素で、緑色は酵素反応の基質だとします。「複雑な化学システムのためのマルチスケール・モデル」では、反応に直接関係する原子（複数の原子からなりますがそれほど多くはありません）のみを量子力学でモデル化し、「反応に直接関係はしない原子を古典力学でモデル化する」という意味でマルチスケール化して酵素反応の解析を可能としたのです。

2013年のノーベル化学賞は計算生命科学に

➤ ノーベル賞の授賞理由

「マルチスケール・モデルは

理論と実験の実りある協力関係を作り上げた」

その協力関係により

「他の方法では解けない問題をも解く道を切り拓いた」

- 計算生命科学がその協力関係の結節点にすることを示す例であり、ある意味、理論と手を結び、実験とも手を結んでいる、つまり両手が必要。

2014年のノーベル賞

The Nobel Prize in Chemistry 2014



Photo: A. Mahmoud
Eric Betzig
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
Stefan W. Hell
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
William E. Moerner
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Chemistry 2014 was awarded jointly to Eric Betzig, Stefan W. Hell and William E. Moerner *"for the development of super-resolved fluorescence microscopy"*.

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2014/

The Nobel Prize in Physiology or Medicine 2014



Photo: A. Mahmoud
John O'Keefe
Prize share: 1/2



Photo: A. Mahmoud
May-Britt Moser
Prize share: 1/4



Photo: A. Mahmoud
Edvard I. Moser
Prize share: 1/4

The Nobel Prize in Physiology or Medicine 2014 was divided, one half awarded to John O'Keefe, the other half jointly to May-Britt Moser and Edvard I. Moser *"for their discoveries of cells that constitute a positioning system in the brain"*.

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/medicine/laureates/2014/

2015年のノーベル賞

The Nobel Prize in Physiology or Medicine 2015

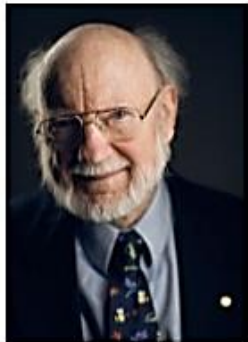


Photo: A. Mahmoud
William C. Campbell
Prize share: 1/4



Photo: A. Mahmoud
Satoshi Ōmura
Prize share: 1/4



Photo: A. Mahmoud
Youyou Tu
Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Physiology or Medicine 2015 was divided, one half jointly to William C. Campbell and Satoshi Ōmura *"for their discoveries concerning a novel therapy against infections caused by roundworm parasites"* and the other half to Youyou Tu *"for her discoveries concerning a novel therapy against Malaria"*.

The Nobel Prize in Chemistry 2015



Photo: A. Mahmoud
Tomas Lindahl
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
Paul Modrich
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
Aziz Sancar
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Chemistry 2015 was awarded jointly to Tomas Lindahl, Paul Modrich and Aziz Sancar *"for mechanistic studies of DNA repair"*.

<http://www.nobelprize.org/>

兵庫・神戸の創薬研究インフラ



大型放射光施設SPRING-8

輝度・エネルギー・指向性などの点で世界最高クラスの放射光を発生が可能

神戸医療産業都市



産業専用スーパー
コンピューター
FOCUS



スーパー
コンピューター

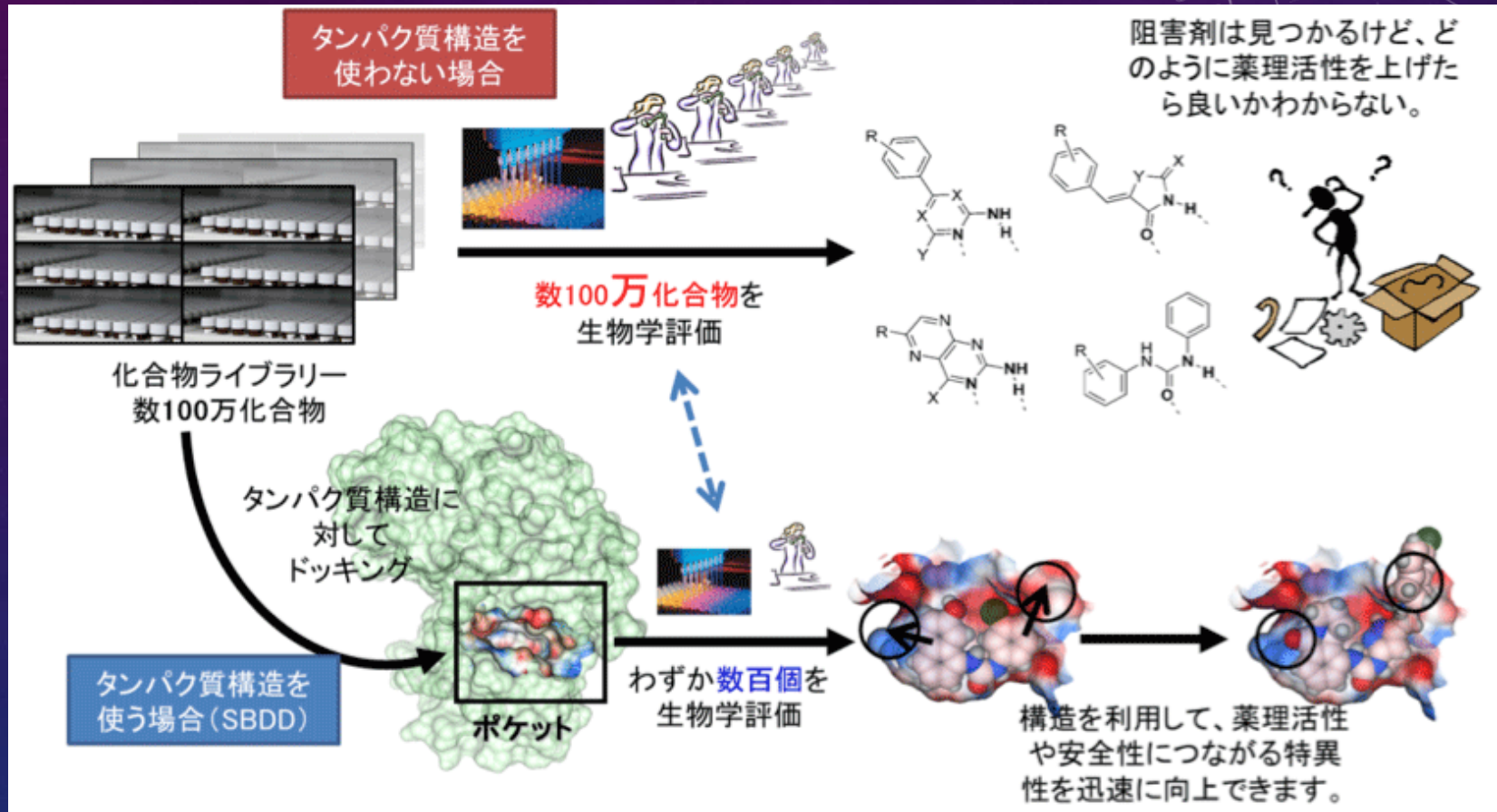


神戸大学
応用構造科学産学
連携推進センター・
構造ベース創薬研
究PJ



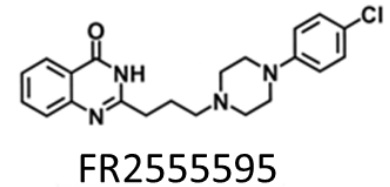
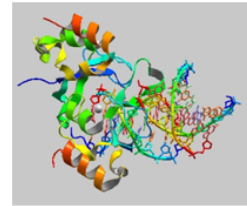
構造科学関連機器
SBDD創薬機能
人材育成機能

構造ベース創薬とは？

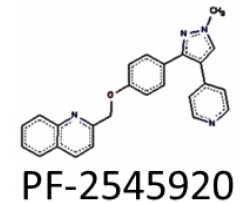
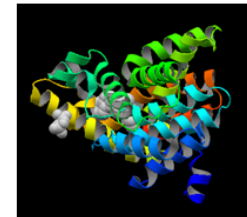


構造ベース創薬の成果①

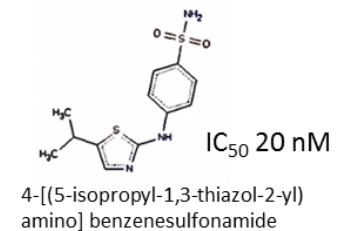
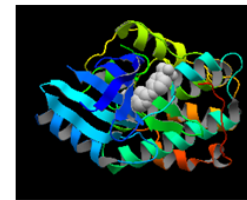
- ▶ Inflammatory disease
Neurodegradative disease
Parkinson's disease
Target: Poly(ADP-ribose) polymerase (PARP)



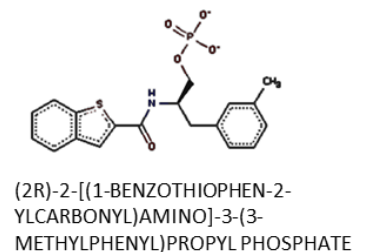
- ▶ Central Nervous Disease, Schizophrenia
Target: Phosphodiesterase 10A



- ▶ Cancer
Target: Cyclin-dependent kinase 2



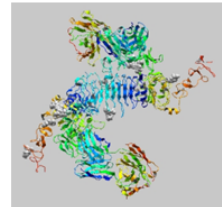
- Target: Pin1, a member of peptidyl-prolyl
cis-trans isomerase (PPIase) family



構造ベース創薬の成果②

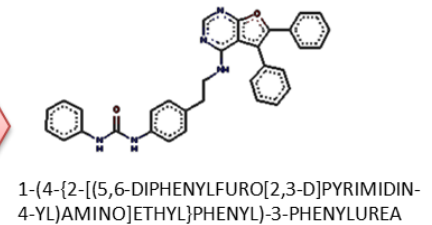
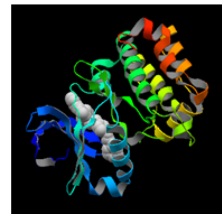
▶ Cancer

Target: HER2, human epithelial growth factor (EGF) receptor type2

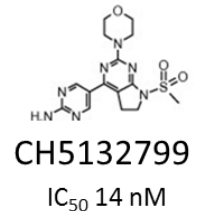
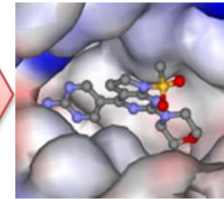
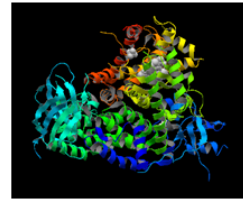


ACE-Pro-His-Ala-
His-Phe-NH2
HRAP

Target: Aurora A Kinase

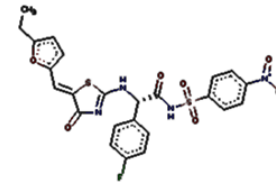
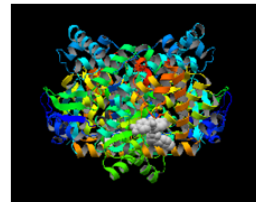


Target: Phosphatidylinositol 3-kinase alpha (PI3K)



▶ Anti HCV therapy

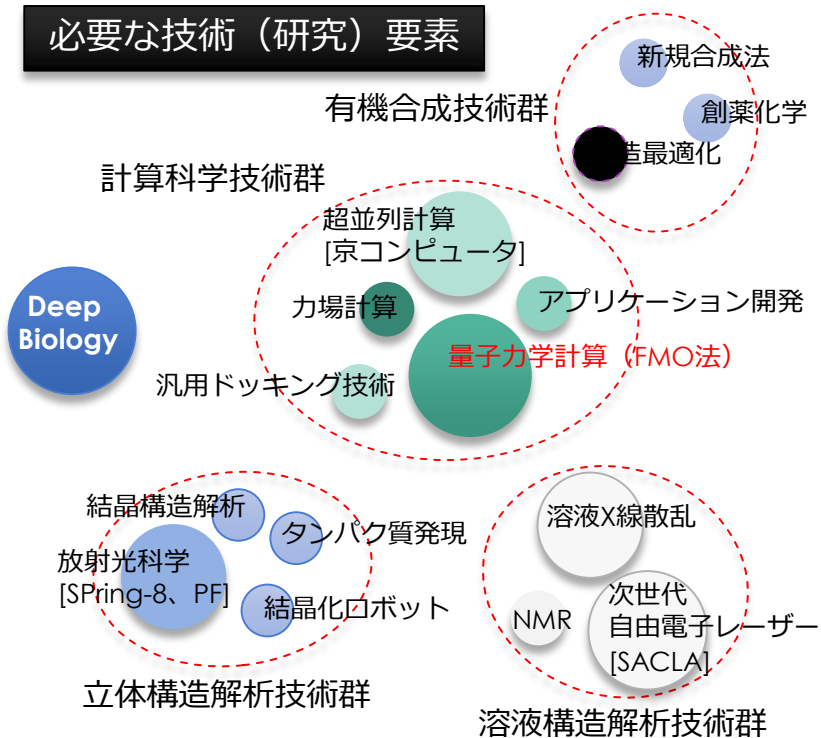
Target: HCV NS5B polymerase



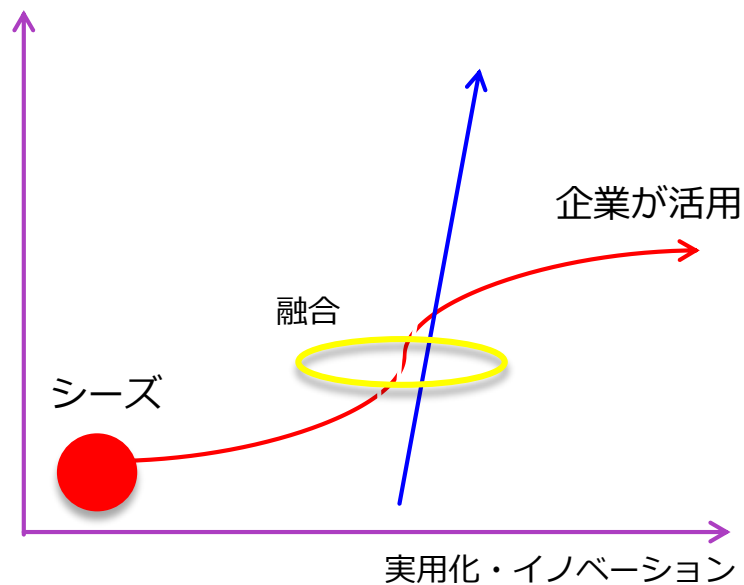
(2S)-2-({(5Z)-5-[(5-ETHYL-2-FURYL)METHYLENE]-4-OXO-4,5-DIHYDRO-1,3-THIAZOL-2-YL)AMINO}-2-(4-FLUOROPHENYL)-N-[(4-NITROPHENYL)SULFONYL]ACETAMIDE

構造ベース創薬 = 構造生命科学 + 計算生命科学 + 創薬化学

必要な技術（研究）要素



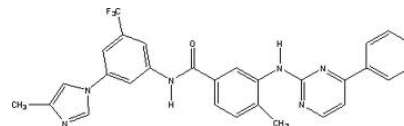
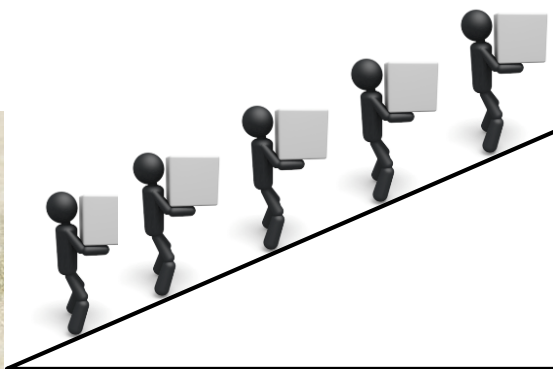
基礎研究の成果(論文・教育)



構造ベース創薬研究

「大学の知(生命科学系の研究成果)」を「実用化できる形(医薬品候補化合物)」に翻訳

研究シーズ



- 論文にはなりにくい
- HTSは「コツ」が必要
- SBDDは大学向き?

Deep Biology

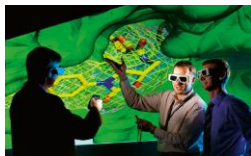
Pathological analysis



- Graduate School of Medicine
- University Hospital
- Profs in Life Science

Target Protein

Functional analysis



In silico Screening

Structural analysis
Docking Simulation

High Throughput Screening

“Hit to Lead”

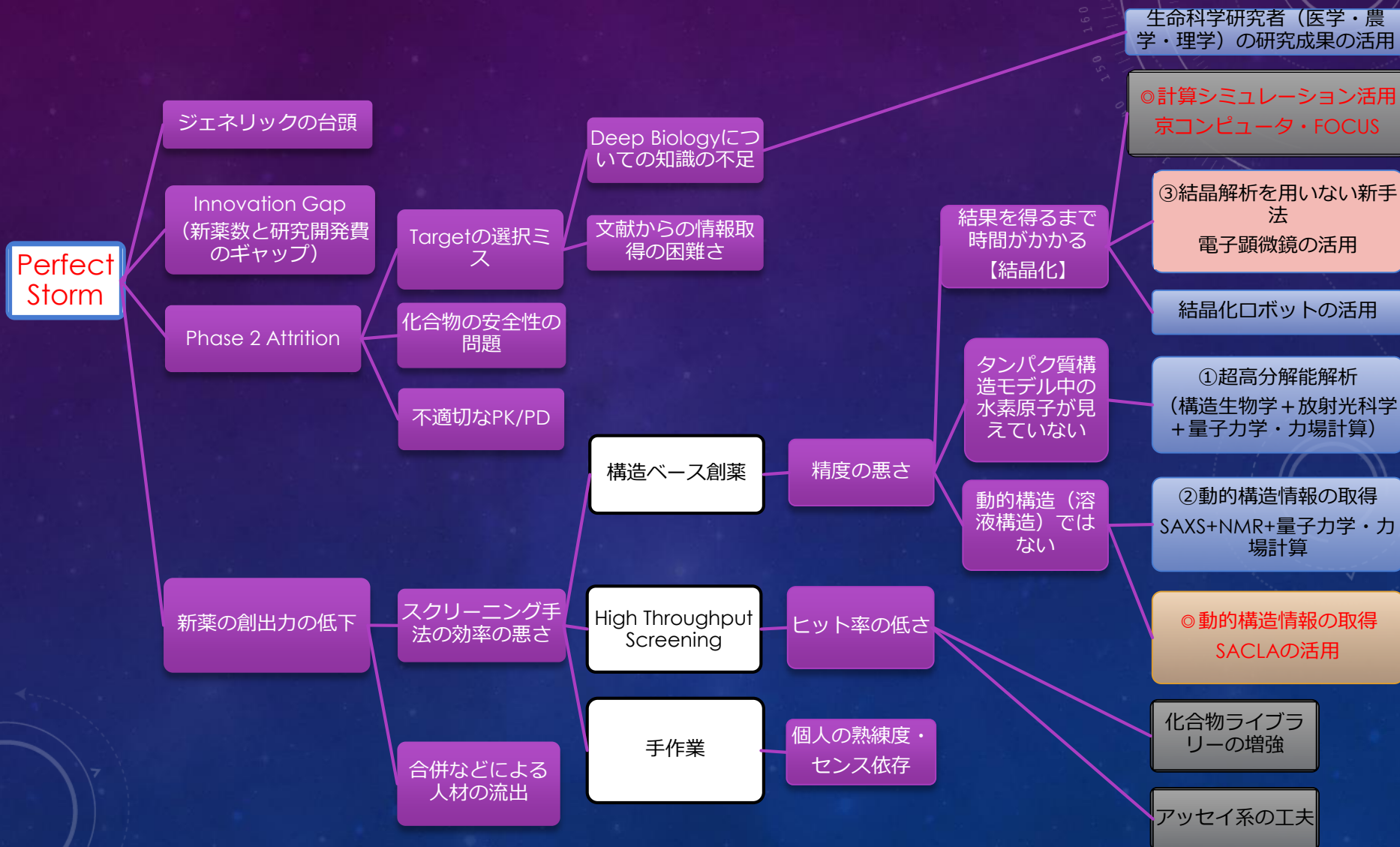
Medicinal Chemistry

Start-up
[organic chemistry]
CRO



如何にして新しい医薬品を設計するか？

..... *Design the compound **right!***



本日の講義内容

- 「計算生命科学の基礎」について
- 計算生命科学とは
- 計算生命科学のインパクト
- 計算生命科学と将来
- シラバス紹介

「計算生命科学」とは?? 生命科学 x 計算科学?

知の融合による学術分野の発展

古典的生命科学

化学・物理

医学・薬学・農学・工学・心理学

構造生命科学

タンパク質化学

結晶学

放射光科学

計算生命科学

計算機科学

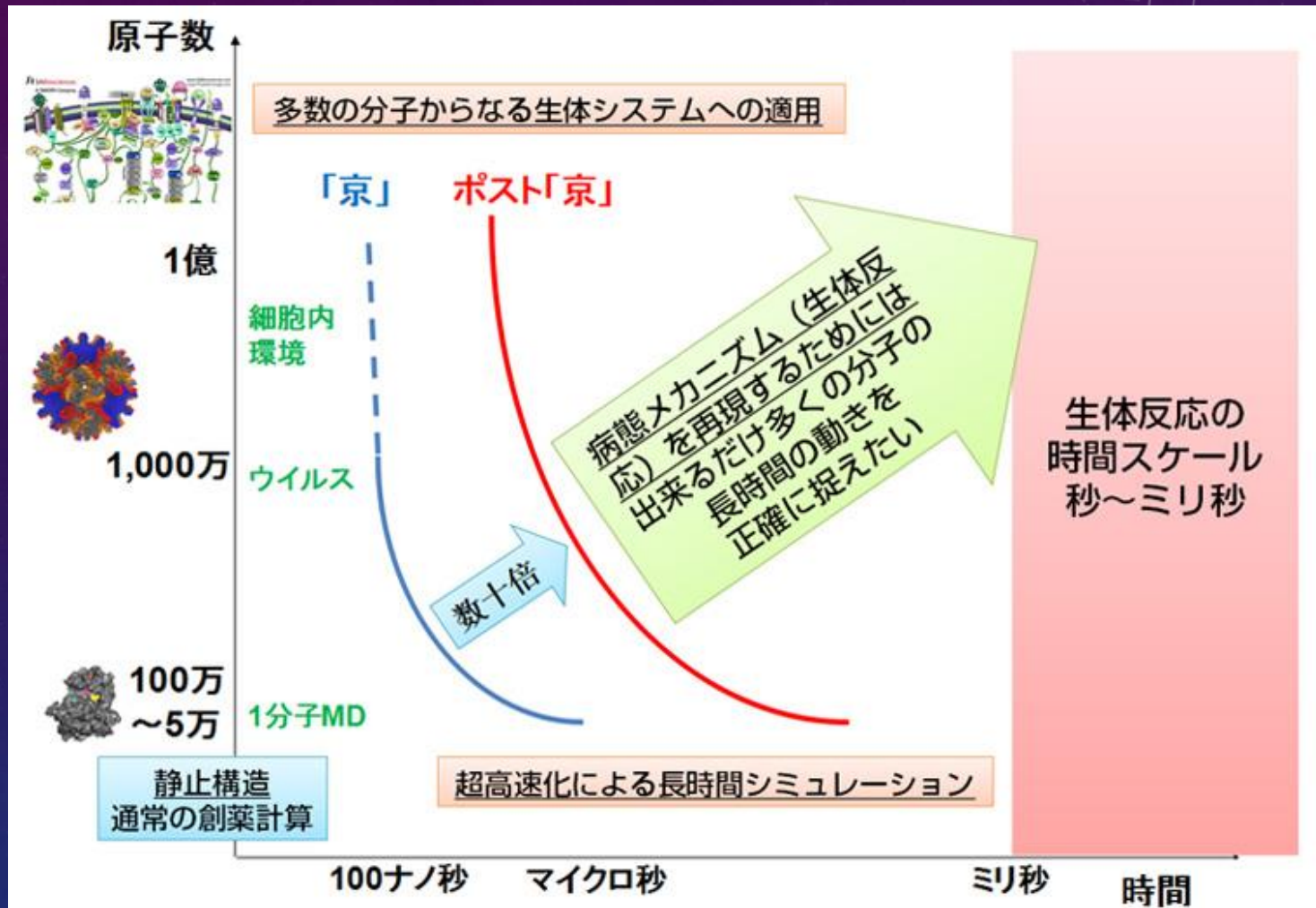
統計学

シミュレーション科学

進化的生命科学

医学・薬学・農業・工業などの実用化への貢献

計算生命科学の進歩と創薬へのインパクト



<https://www.youtube.com/watch?v=2JU2LjPDrQY>

生命科学と情報科学

21世紀 生命科学と情報科学

バイオインフォマティクスへの期待

生命情報科学、生命情報学
計算生物学、計算情報生物学
システム生物学、生命情報システム学

- 「生命現象の解明に情報科学技術を活用する」
- 「生命現象を情報科学的に理解する」
- 「生命現象を情報システムとして理解する」
- 「生命現象から情報科学技術を学ぶ」
- 「生命体となじむシステムを開発する」

生命現象の

個別的・部分的な解析から総合的・包括的な解析へ

生命科学(LS)

情報科学(IS)



脳／思考・記憶
感覚／認識
運動・行動
遺伝・進化
発生・分化・老化
免疫システム



コンピュータ
人工知能
ニューラルネットワーク
画像認識・処理
音声認識・処理
ロボット
通信・制御
遺伝アルゴリズム
人工生命

遺伝子・タンパク質・細胞

Bioinformatics
Computational Biology
Systems Biology

大量情報処理技術
複雑系の解析技術
複雑系の表現技術

計算科学の将来

3つの要因

計算機の進歩

京 → ポスト「京」

ビッグデータ

計算技術の進歩



進化した計算生命科学が与える未来へのインパクト

計算生命科学



医学・薬学・農業・工業などの実用化への貢献



社会システムの変化



未来創造

Society5.0



http://www.mext.go.jp/b_menu/hakusho/html/hpaa201601/detail/1374223.htm

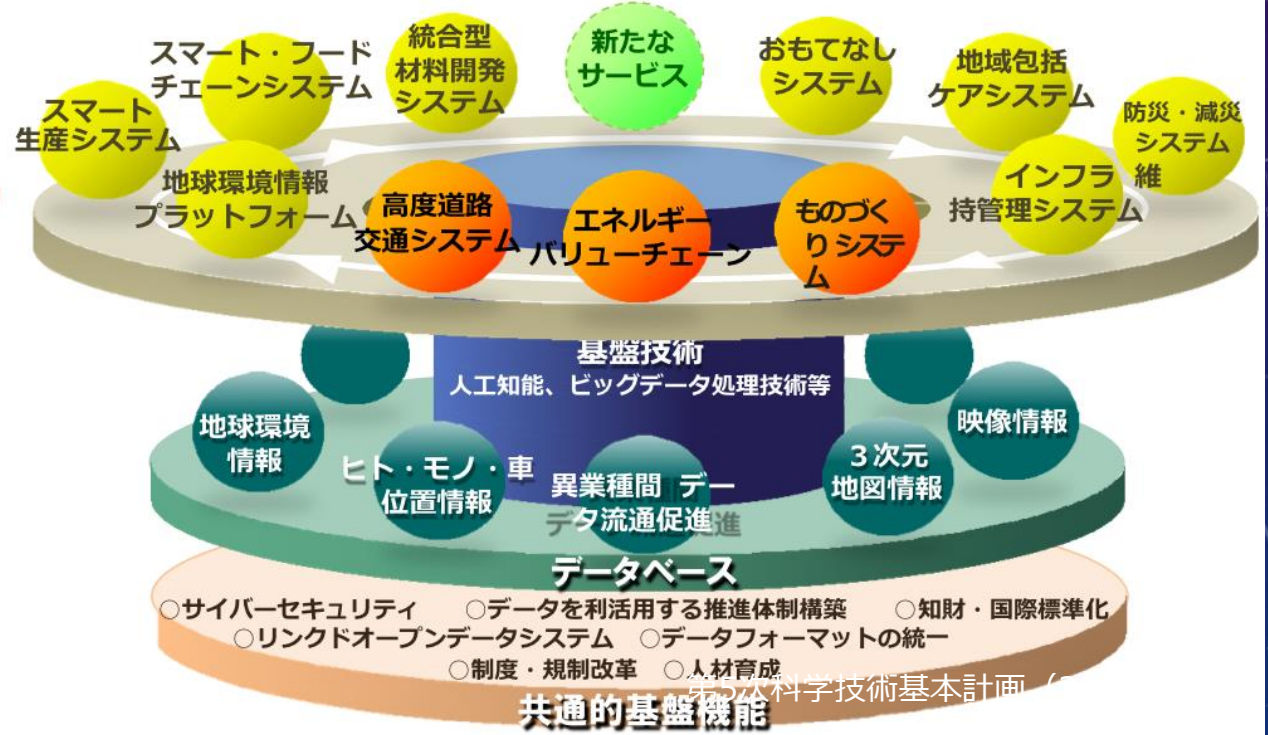
「必要なもの・サービスを、必要な人に、必要な時に、必要なだけ提供し、社会の様々なニーズにきめ細かに対応でき、あらゆる人が質の高いサービスを受けられ、年齢、性別、地域、言語といった様々な違いを乗り越え、生き活きと快適に暮らすことのできる社会」

- 全てがネットに繋がっていてAIやBig Dataによってインテリジェンスを有している社会で人間が豊かに暮らすという超スマート社会
- 見えないデータ・過去のデータにない現象→最先端理論（Algorithm Theory）+大規模実データ（Big Data）+最新計算技術（Computation）で予測と制御が可能

第5次科学技術基本計画（2016）

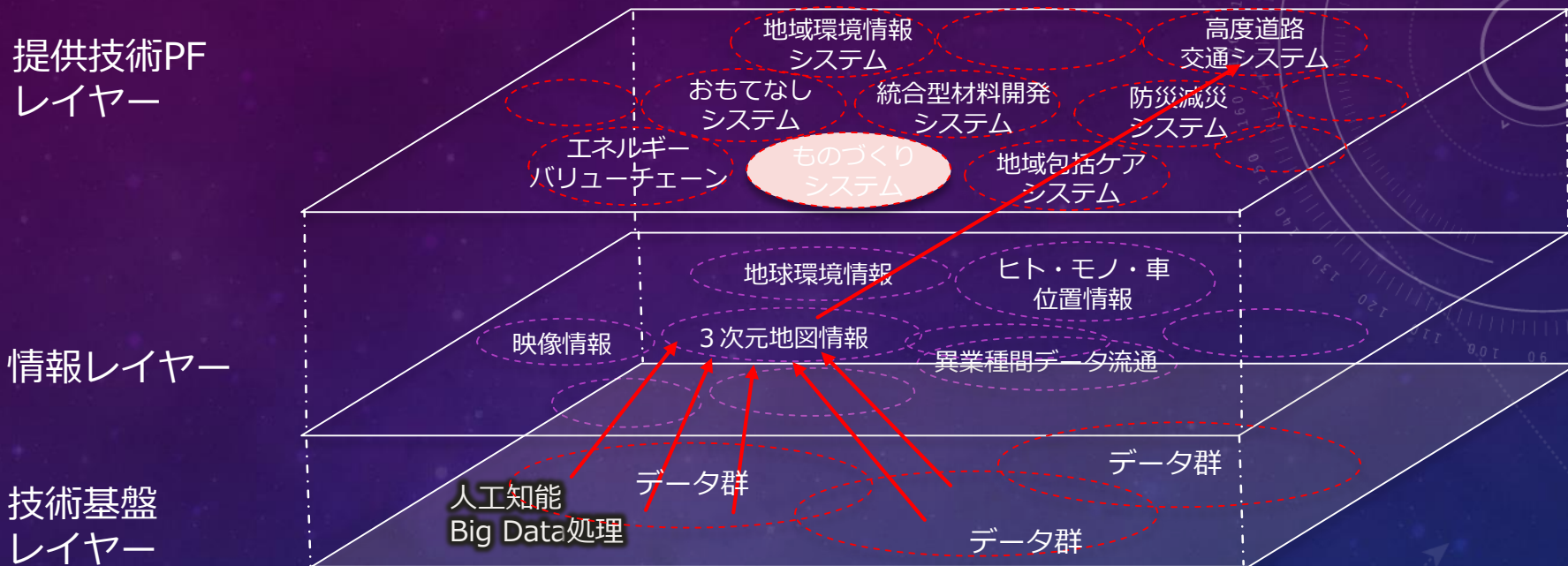
Society5.0

- ヒトの流れ(空気・雰囲気)、移動経路及び到着予想時間の可視化
 - **確率過程モデル及びネットワークフローアルゴリズム (HPC)**
- 動線データ(ヒトの流れ)の蓄積と活用→テナントなどのスペースの価値決定
- 災害時の避難誘導(混雑時の誘導も含む)
- 買い物や食事などのサービスを含めた路線検索
 - **AR (拡張現実)+位置情報技術による誘導**



**システム化(機能の連関)が不十分?
何が各システムをつなぐのに重要か?**

Society5.0におけるデータと計算の重要性



情報 = データ + 価値 (課題に依存)

- 「知識」 = 情報 + 技能
 - ・ 情報 = データ + 価値 (問題・課題によって異なる)
 - ・ 技能 (スキル) = テクニク + 価値 (問題・課題によって異なる)
- 「人間性」 = 多様性 + 価値

「データ」と「情報」

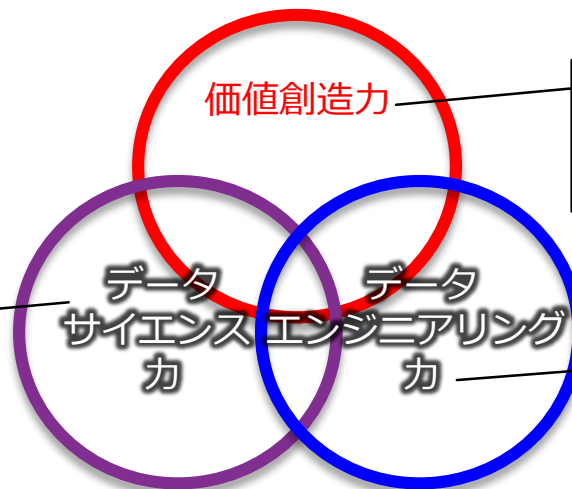
- 物事の推論の基礎となる事実。また、参考となる資料・情報。
「データを集める」「確実なデータ」
- コンピューターで、プログラムを使った処理の対象となる記号化・数
字化された資料。
- 端的に言うと、意味のあるデータが「情報」である。

□ **事実**・・・現実に起こり、または存在する事柄。本当のこと。

□ **解釈**・・・物事や行為などを判断し理解すること。文章や作品や物事の意味を、**受け手の視点**で、理解したり説明したりすること

「データ」を活用して
問題を解決する力

情報処理、人工知能、統計学などの情報科学系の知識・スキルを理解し、使う力



課題を理解した上で、問題定義し、提供価値を考える力

データを意味のある形として使えるようにし、実装、運用できるようにする力

新たなデータ関連人材育成プログラム

データ関連人材育成プログラム

平成29年度予算額 : 213百万円 (新規)

- 我が国が第4次産業革命を勝ち抜き、未来社会を創造するためには、AI、IoT、ビッグデータ、セキュリティ等を扱うデータ関連人材の育成・確保が喫緊の課題。
- 博士課程学生・博士号取得者等の高度人材に対して、データサイエンス等のスキルを習得させる研修プログラムを実施することにより、我が国社会で求められるデータ関連人材を育成し、社会の多様な場での活躍を促進。
- 研修プログラムの開発・実施を行う育成機関が、データ関連人材の雇用を希望する企業、大学等とコンソーシアムを形成し、博士課程学生・博士号取得者等に対して、インターンシップ・PBL※等による研修プログラムを開発・実施することで、各々の専門性を有しながら、データサイエンス等のスキルを習得させるとともに、キャリア開発の支援を実施。 ※(Project-Based Learning : 課題解決型学習)



- ・ 育成機関が、データ関連人材の雇用を希望する複数の企業、大学等の他機関とコンソーシアムを形成
- ・ 育成機関が博士課程学生・博士号取得者等を募集・選定し、コンソーシアム参加機関からデータの提供等を受けながら、データサイエンス等のスキルを習得させるための研修プログラムを開発・実施
- ・ 研修プログラム修了者のコンソーシアム参加機関を含む社会の多様な場での活躍を促進
- ・ 研修プログラムの開発に当たっては、AIPプロジェクト(※)による成果も活用

※AIPプロジェクト(人工知能/ビッグデータ/IoT/サイバーセキュリティ統合プロジェクト、平成28年度開始事業)
・ 人工知能の革新的な基盤技術の研究開発等を一体的に実施

- 【支援対象経費】
研修プログラムの開発・実施経費
(補助率1/2、補助金上限額70百万円)
- 【事業期間】
8年間(補助対象期間は5年間)
※3年目に中間評価を実施
- 【支援拠点数】
3拠点(コンソーシアム)程度
- 【研修対象人数】
70人程度/年・拠点

新たなデータ関連人材育成プログラム

データ関連人材育成関西地区コンソーシアム（代表機関：大阪大学）

関西地区において産官学が**本気**で連携し、データ関連人材育成の広域拠点を形成し、データ関連人材の輩出を起点とした産業構造の変革を実現する。

■ 受講者がデータ関連知識・スキルを習得できる網羅的教育プログラム

A:データサイエンス基礎コース

ビジネス創出や社会問題解決において、課題設定、データサイエンス全体俯瞰能力向上、データ収集・統合、データ分析、データ解釈の能力を身につける座学講義。各大学のプログラムを相互補填・連動して提供（年度ごと開講、e-Learning）



B:データサイエンス実践コース

オープンデータ・企業が公開するデータを活用した問題解決型（実践型）Project Based Learning、インターンシップ、共同研究型研修（実習）プログラム（神戸大学・和歌山大学・奈良先端科学技術大学院大学で実施、半年～1年コース）

Aコースを修了すると（約半年）・・・基礎コース修了証

AコースとBコースを修了すると（1年間～）・・・データサイエンス認定書

C:医療データ基礎実践コース

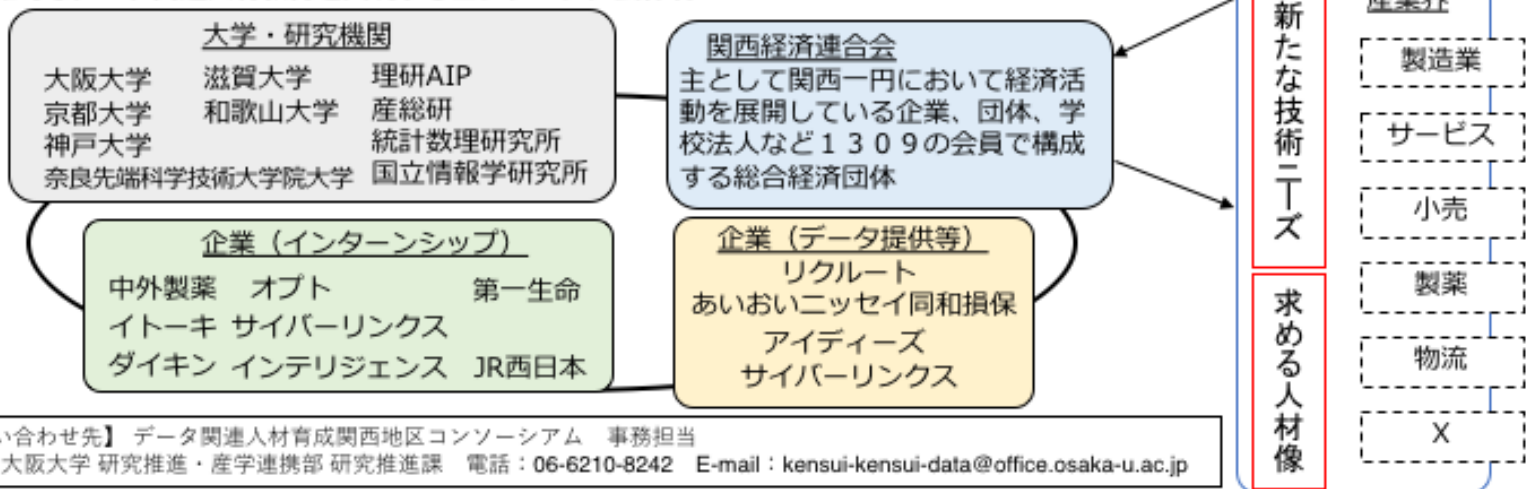


医師・医療従事者が持つ医療データを分析・解析・解釈し、自らの医療スキル向上や学会発表につなげたいというニーズに基づいた短期集中型研修。医療データの収集・統合・分析・解釈の知識・スキルについてのe-Learningと実際の医療への適用についての座学・ケーススタディなど半日程度の研修として実施。

※A、Bコースともに大学が持つ優れた教育コンテンツに基づいたシーズトリップ型教育

Cコースを修了すると（e-Learning+半日実習）・・・医療データコース認定書

■ 網羅的なデータ関連人材教育を実現するコンソーシアム体制



【問い合わせ先】 データ関連人材育成関西地区コンソーシアム 事務担当
大阪大学 研究推進・産学連携部 研究推進課 電話：06-6210-8242 E-mail：kensui-kensui-data@office.osaka-u.ac.jp

人工知能



現在、人工知能(AI)の保健医療分野への活用が検討されている。厚生労働省は2017年4月中旬、安倍晋三首相が議長を務める「成長戦略をつくる未来投資会議」にて、画像診断支援やゲノム医療を中心に、医療や介護分野へのAIの本格導入を促進するガイドラインを策定し、AIによる医療体制の整備に必要な基盤を固めた。

□ 皮膚ガン検査

- 画像による人工知能(AI)皮膚がん診察アルゴリズムを開発。
- 13万枚弱の画像と各画像に対する医師の診断データをデータベースにまとめ、深層学習アルゴリズムに読み込ませた。
- そのうえで診察させたところ、初期段階から優秀な結果が得られたようだ。



Dermatologist-level classification of skin cancer with deep neural networks

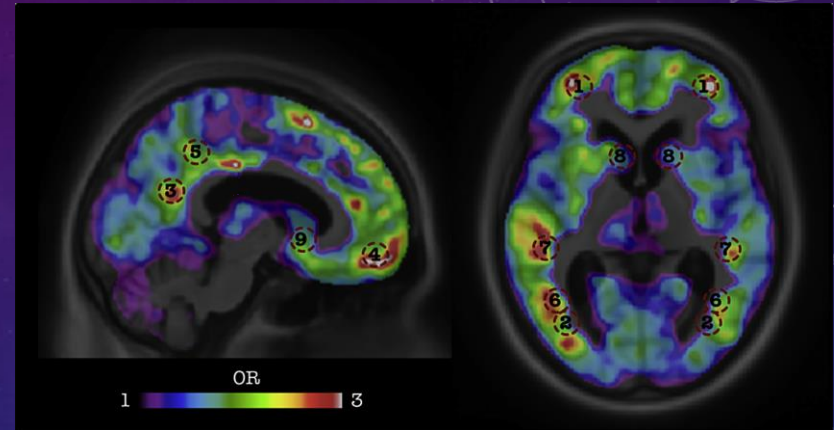
Andre Esteva, Brett Kuprel, Roberto A. Novoa, Justin Ko, Susan M. Swetter, Helen M. Blau & Sebastian Thrun

Nature 542, 115–118 (02 February 2017) doi:10.1038/nature21056

人工知能

□ 人工知能で効果的に認知症の発症を予測する

- アルツハイマー型の患者さんの脳には、「アミロイドβ」とよばれるタンパク質が溜まっているのが特徴
- アミロイドβタンパク質は、ある日突然増えるわけではない。認知症を発症する10年も前から、徐々に溜まり始めると言われている。
- これを早期に発見するために威力を発揮するのが「ポジトロン断層撮影法(PET)」です。「ポジトロン」という物質が体内に入ると、そこから放射線が発せられ、これを画像化して病気の診断をします。
- 「人工知能(ランダムフォレスト)」という方法で、アミロイドPETの画像から、効果的に、また高速に、将来的に認知症を発症するリスクがどれくらいあるかを判断する。



予測精度84%

Identifying incipient dementia individuals using machine
Mathotaarachchi S. et al.
Neurobiol Aging. 2017 Jul 11. pii: S0197-4580(17)30229-4.

人工知能

□ 人工知能で心臓発作を予測

- イギリスのノッティンガム大学の研究者、ステファン・ウェインが発表。
- 通常の意味による心臓発作の予測は、米国心臓病学会が作成したガイドラインを使用する。
- ステファンはニューラルネットワークを使った機械学習で、過去のデータを分析して心臓発作の予測率を求めると74.5~76.4%の精度となった。
- これに対し、ガイドラインを使った精度は72.8%なのである。
- 彼が調べたデータベースでは、この差は355件となった。つまり、ガイドラインで予測せず、AIを使った予測を使えば**355人多く助かった**ことになるのである。



国立循環器病研究センター(大阪府吹田市)は、米IBMの「ワトソン」などの人工知能(AI)を使って、心筋梗塞こうそくなど循環器系の病気の発症や重症化のリスクを予測する研究を始めたと発表した。

本日の講義内容

- 「計算生命科学の基礎」について
- 計算生命科学とは
- 計算生命科学のインパクト
- 計算生命科学と将来
- シラバス紹介

「計算生命科学の基礎」

第1編 ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用

第1編 ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎

1.1「遺伝統計学の基礎と応用」

(担当: 岡田 随象)《10月11日(水)》

遺伝統計学 (statistical genetics) は、遺伝情報と形質情報の関わりを統計学の観点から研究する学問分野であり、一次的に処理されたゲノム情報を適切に解釈し、社会還元するためのデータ解析学問として注目されている。大規模ヒト疾患ゲノム解析により同定された数多くの疾患感受性遺伝子の情報を、多彩な生物学・医学データベースと分野横断的に統合することにより、新たな疾患病態の解明や、疾患バイオマーカーの同定、新規ゲノム創薬、疾患疫学の謎の解明、等に貢献できると期待されている。

1.2 「ゲノムクスからの構造インフォマティクス」

(担当:白井 剛)《10月18日(水)》

大規模ヒト疾患ゲノム解析により疾患関連変異の探索は極めて効率化されたが、通常その情報を疾患メカニズムから創薬などの応用へ繋げるためには、分子構造の解析が必要になる。このとき、ゲノム情報量と分子構造情報量のギャップが問題となるが、構造インフォマティクスはこのギャップを埋めるための手段である。この講義では、なるべく具体例を示しながら超分子モデリング、相互作用予測、疾患変異マッピング解析などの手法について解説する。

1.3 「電子顕微鏡解析」

(担当:川端 猛)《10月25日(水)》

近年、低温電子顕微鏡の単粒子解析による3次元分子構造の解析技術が大きく進展し、X線結晶解析・NMRに並ぶ第三の構造解析技術として定着しつつある。この進歩は、電子直接検出器などのハードウェアの刷新とともに、EMAN2,Relionなど優れた画像処理プログラムの開発によるものが大きい。本講義では、単粒子解析の情報処理の各技術(2D画像分類、3D画像再構成、原子モデリング)を順に説明し、大量の2D画像データ群から高解像度の3D画像と原子モデルを推定するための計算法を概説する。

1.4 「機械学習・人工知能技術入門」

(担当:瀬々 潤)《11月1日(水)》

生命科学から算出されるデータを解析することで、基礎免では生命の理解、応用面では医療、創薬、農学へと繋げていく期待は高い。本講義ではこれらの解析の基礎となる企画学習や数理統計技術の説明にはじまり、いわゆる人工知能の導入を行う。その上で、計算生命科学への応用に関する現状と議論を行う。

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

2.1 「計算生命科学のための量子化学基礎」

(担当: 平野 敏行)《11月8日(水)》

量子化学シミュレーションは、実験化学と相補的に用いることで物性・化学反応の解明に威力を発揮する、強力な研究手法である。コンピュータの性能向上と計算手法の進歩により、これまで難しいと考えられてきた大規模生体分子の量子化学シミュレーションが実用的になりつつある。量子化学シミュレーションの理解を助ける量子化学計算理論・計算法や分子生物学の基礎から、最新のタンパク質カノニカル量子化学計算について紹介する。

2.2 「フラグメント分子軌道法に基づく創薬分子設計の現実と課題」 (担当: 福澤 薫)《11月15日(水)》

タンパク質の全電子計算が可能なフラグメント分子軌道(FMO)法によって、これまでにない高精度の構造ベース創薬が可能になってきている。FMO法は、新規化合物の精密な設計や合理的なリード化合物の最適化、インシリコスクリーニング、さらにはビッグデータに基づく創薬へと繋がることが期待されている。講義では産学官連携のFMO創薬コンソーシアムやスーパーコンピュータの活用など、FMO創薬の現状と課題について概説する。

2.3 「QM/MM方を用いたタンパク質の機能解析」 (担当: 鷹野 優)《11月22日(水)》

タンパク質は巨大かつヘテロな系であり、機能を有効に発揮できるように、その「かたち」を変化させる。タンパク質機能の理解・予測に、機能発現に関わる局所部分(活性中心)には量子力学(QM)を、活性中心を取り囲むタンパク質の「かたち」の変化には古典力学(MM)を適用したQM/MM法は極めて有効である。本講義ではQM/MM法の理論背景からはじめ、タンパク質の機能解明への応用について紹介する。

2.4 「生命系の分子動力学シミュレーション」

(担当:池口 満徳)《11月29日(水)》

生体分子モーターなど、多くの生体分子は動くことで機能している。そのような生体分子の動きについて、コンピュータによって研究する方法が分子動力学シミュレーションである。本講義では、分子動力学シミュレーションの基礎から、タンパク質や核酸などの生体分子に適用した事例まで解説する。

2.5 「分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援」

(担当:広川 貴次)《12月6日(水)》

タンパク質立体構造解析技術の発展により、構造生物学データを起点とした創薬支援研究が本格的に促進されている。しかし、構造生物学データの中には、特定の条件や環境に依存した構造情報もあり、そのままのデータでは創薬へ適用が難しいものがある。分子モデリングや分子シミュレーションは、このような問題を補完できる技術として注目されている。講義では、構造生物学データと創薬を橋渡しする高度なインシリコ創薬支援技術について概説する。

第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用

3.1 「確率モデリング技術の基礎と応用～ビッグデータ活用のための人工知能技術」

(担当:本村 陽一)《12月13日(水)》

ビッグデータを活用する人工知能技術に大きな期待が寄せられている。実社会で生成される各種のビッグデータを活用する人工知能技術として機械学習の発展が近年爆発的な性能向上をもたらした。本講義では機械学習分野に概観と、その中で不確実な現象のモデル化に用いられる確率モデリング技術の基礎と応用について解説する。

3.2 「ヒトを対象とした医学研究のデザインと解析手法」

(担当: 田中 佐智子)《12月20日(水)》

ヒトの健康・疾病に関連するリスク要因を探求する場合、ヒトを対象とした医学研究の実施が必要となる。本講義では、健常人10万人を追跡した大規模研究において、遺伝子・バイオマーカーなどのリスク要因を評価するための研究デザインと解析手法を紹介する。また、患者を対象とした医学研究のデザインと解析手法についてもふれ、高次脳神経機能やバイオマーカーの評価の実例を紹介する。

3.3 「計算システム生物学と創薬」

(担当: 水口 賢司)《1月10日(水)》

コンピュータによるモデリングを実現するための基盤技術として、1)データ統合とデータベース構築、2)機械学習を中心とする統計モデリング、3)一般的な基本原理に基づく数理モデリング、の3つをあげることができる。特に、異なった種類のデータを統合することは各種モデリングの鍵であり、これらの概念を中心に計算システム生物学の創薬研究への応用を概観する。

3.4 「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と最適化設計」

(担当: 本間 光貴)《1月17日(水)》

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。また、現場の創薬ではヒットが得られた後の活性やADMETプロファイルの向上を目指した設計も重要である。本講義では、インシリコスクリーニングの精度を向上させるためのポイントについて説明するとともに、ヒットが得られた後の設計手法についてAMEDの創薬インフォマティクスシステム構築で開発中の心毒性予測モデル等を含めて紹介する。

3.5 「Real World Data:統計か疫学かコンピュータサイエンスか」

(担当: 田崎 武信)《1月24日(水)》

統計学を愛するがゆえにデータマイニングを学び、統計学を愛するがゆえに機械学習を学び、そしていまは、統計学を愛するがゆえに疫学を学んでいる。いまの疫学は昔とくらべ格段にてごわく、社会科学分野の「実証分析」にも応用されている。ずいぶん(数十年)前になるが、神戸大学の計測工学/システム工学で統計学を非常勤で14年間教えた。そこでは学生から多くのことを学んだ。その経験を踏まえ、医療データの解析で存在感を持ち続けている統計学を紹介したい。

「計算生命科学」は……

理学、工学、生物学などの枠を超えた協力関係でさらに進化

この講義は実験生命科学 及び 広く理工系の方々を対象

生命科学を志す皆さんには、

意識するとしないにかかわらず、研究室にある実験・計測装置から生み出される大量のデータや、世界的に公開されている膨大な生命科学データベースを基盤に研究を進めることが求められてくると思います。

理学、工学を志す皆さんには、

その基礎的な理論を生命科学に生かしていく場がますます広がってきているとともに、生命科学の方々から連携を強く求められてくると思います。

この講義により理学、工学、生物学などの枠を超えて、「理論、計算、観察・実験の協力関係がより一層深まって行くことを願っています。」

遠隔インタラクティブ講義

計算生命科学の基礎IV

計算科学と生命科学の融合

基礎から医療・創薬・人工知能への応用まで

皆様のご聴講を
心よりお待ちしております。