

開講科目名 /Course	ドラッグデザイン特論/Basics on Practical Drug Design	
時間割コード /Course Code	47240-59	
共通科目コード /Common Course Code	GFS-MJ7D09L1	
学部/大学院 /Undergraduate/Graduate	大学院/Graduate	
開講所属 /Course Offered by	新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻/Graduate School of Frontier Sciences Computational Biology and Medical Sciences	
ターム・学期 /Term・Semester	2022年度/Academic Year A 1/A1	
曜限 /Day, Period	集中/Int 4, 集中/Int 5	
開講区分 /semester offered	A1A2/A1A2	
単位数 /Credits	2	
学年 /Year	M1/M2/D1/D2/D3	
他学部履修 /Available to students in other	可	
備考 /Notes		
主担当教員 /Main Instructor	広川 貴次、齋藤 裕	
教室 /Classroom		
教員名 /Instructor	教員所属名 /Affiliation	職名 /Job Title
広川 貴次	メディカル情報生命専攻	
齋藤 裕	メディカル情報生命専攻	
浅井 潔	メディカル情報生命専攻	教授
講義題目 /Subtitle		
授業の目標、概要 /Course Objectives/ Overview	本講義では、バイオインフォマティクスとケモインフォマティクスによる創薬研究の目的・原理・現状を理解することを目標とします。タンパク質立体構造に基づく医薬品探索 (Structure-based drug design)、化合物情報に基づく医薬品探索 (Ligand-based drug design) の基礎を学び、蓄積・共有されつつある遺伝情報・構造生物学の膨大なデータを活用する機械学習による生体分子設計を紹介します。	
授業情報 /Class information		
授業のキーワード /Keywords	日本語用 /Japanese  英語用 /English	ドラッグデザイン、創薬インフォマティクス、機械学習  drug design, drug discovery informatics, machine learning

<b>授業計画</b> /Schedule	<b>【講義日程・担当】</b> 木曜、4限・5限のうち、以下の日程・担当で講義を行う。 10/13 広川 11/17 広川 11/24 広川 12/1 広川 12/8 広川 12/15 齋藤  <b>【講義内容】</b> 広川担当分 1. 化合物情報に基づく医薬品探索 分子表現と類似性検索 化合物データベース 記述子による薬らしさの表現、ファルマコフォア、最適化手法 2. タンパク質立体構造に基づく医薬品探索 Pre-Docking (レセプターモデリング、分子動力学、標的タンパク質同定) Docking (探索/スコアリング、Induced-Fit、バーチャルスクリーニング) Post-Docking (ポーズ判定、高精度エネルギー計算、相互作用フィンガープリント) 3. 応用事例解説 タンパク質-タンパク質阻害剤探索、ドラッグリポジショニング等  齋藤担当分 4. 機械学習による生体分子設計 機能性タンパク質の設計 mRNAの設計 (翻訳効率の向上) プロモーターDNAの設計 (転写活性の向上)
<b>授業の方法</b> /Teaching Methods	オンライン講義を行う。
<b>成績評価方法</b> /Grade Evaluation	出席、小テスト、およびレポートによる。
<b>教科書</b> /Textbook	特に定めない
<b>参考書</b> /Reference	特に定めない
<b>履修上の注意</b> /Notes on Taking the Course	オンライン講義を予定している。 オンライン講義URLは変更されることがあるので、毎回確認して参加すること。 2019年度の情報生命科学特別講義Ⅲを履修して単位を取得したものは、本科目を履修できない。
<b>関連ホームページ</b> /Course-Related Websites	<a href="http://asailab.cb.k.u-tokyo.ac.jp/lecture/">http://asailab.cb.k.u-tokyo.ac.jp/lecture/</a>
<b>メールアドレス</b> /e-mail address	asai@k.u-tokyo.ac.jp
<b>授業使用言語</b> /Language Used in Class	日本語