

基本情報/Basic Information

開講科目名 ／Course Title	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 or 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
曜限 ／Day, Period	集中／Int
開講区分(ターム・セメスター) ／Offering Period (Term or Semester)	A1A2／A1A2
単位数 ／Credits	2.0
学年 ／Year	M1/M2/D1/D2/D3
他学部履修 ／Cross-Departmental Enrollment	可
備考 ／Notes	
主担当教員 ／Lead Instructor	瀧川 一学、広川 貴次、齋藤 裕
キャンパス ／Campus	その他
教室 ／Classroom	その他(学外等) オンライン／Other (Outside Campus) Online

担当教員情報/Instructor Information

教員名 ／Instructor	教員所属名 ／Affiliation	職名 ／Job Title	メールアドレス ／E-mail
瀧川 一学	メディカル情報生命専攻	教授	
齋藤 裕	メディカル情報生命専攻	客員教員	
伊藤 耕一	メディカル情報生命専攻	教授	
木立 尚孝	メディカル情報生命専攻	准教授	
広川 貴次	メディカル情報生命専攻	講師（非常勤）	

講義題目 ／Course Topic			
授業の目標、概要 ／Course Objectives and 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
学問分野 ／Academic Field	62:応用情報学／Applied informatics、43:生物学（分子レベルから細胞レベル）／Biology at molecular to cellular levels		
授業計画 ／Course Plan	<p>【講義日程・担当】</p> <p>木曜日 4限：14:55～16:40 5限：16:50～18:35</p> <p>12月3日 広川</p> <p>12月10日 広川</p> <p>12月17日 広川</p> <p>1月7日 齋藤</p> <p>1月14日 広川</p> <p>1月21日 広川</p> <p>【講義内容】</p> <p>広川担当分</p> <p>1. 化合物情報に基づく医薬品探索</p> <p>分子表現と類似性検索</p> <p>化合物データベース</p> <p>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</p> <p>2. タンパク質立体構造に基づく医薬品探索</p>		

	<p>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)</p> <p>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</p> <p>齋藤担当分</p> <p>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)</p>																																										
授業の方法 <i>Teaching Methods</i>	オンライン講義を行う。																																										
成績評価方法 <i>Grading Policy</i>	出席、小テスト、およびレポートによる。																																										
教科書 <i>Textbook</i>	<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 40%; padding: 5px;">使用の有無</td><td style="width: 60%; padding: 5px;">教科書は使用しない。／Will not use textbook</td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">著者(訳者)名</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Author (Translator)</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">書名</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Title</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">出版社</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Publisher</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">ISBN</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／ISBN</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">その他</td><td style="padding: 5px;">特に定めない</td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Other</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">著者(訳者)名</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Author (Translator)</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">書名</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Title</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">出版社</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Publisher</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">ISBN</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／ISBN</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">その他</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> <tr> <td style="padding: 5px;">／Other</td><td style="padding: 5px;"></td></tr> </table>	使用の有無	教科書は使用しない。／Will not use textbook	著者(訳者)名		／Author (Translator)		書名		／Title		出版社		／Publisher		ISBN		／ISBN		その他	特に定めない	／Other		著者(訳者)名		／Author (Translator)		書名		／Title		出版社		／Publisher		ISBN		／ISBN		その他		／Other	
使用の有無	教科書は使用しない。／Will not use textbook																																										
著者(訳者)名																																											
／Author (Translator)																																											
書名																																											
／Title																																											
出版社																																											
／Publisher																																											
ISBN																																											
／ISBN																																											
その他	特に定めない																																										
／Other																																											
著者(訳者)名																																											
／Author (Translator)																																											
書名																																											
／Title																																											
出版社																																											
／Publisher																																											
ISBN																																											
／ISBN																																											
その他																																											
／Other																																											

	<p>著者(訳者)名 ／Author (Translator)</p> <p>書名 ／Title</p> <p>出版社 ／Publisher</p> <p>ISBN ／ISBN</p> <p>その他 ／Other</p>
参考書 ／Reference Book	<p>使用の有無 ／Use of Reference Book</p> <p>参考書は使用しない。／Will not use reference book</p> <p>著者(訳者)名 ／Author (Translator)</p> <p>書名 ／Title</p> <p>出版社 ／Publisher</p> <p>ISBN ／ISBN</p> <p>著者(訳者)名 ／Author (Translator)</p> <p>書名 ／Title</p> <p>出版社 ／Publisher</p> <p>ISBN ／ISBN</p> <p>著者(訳者)名 ／Author (Translator)</p> <p>書名 ／Title</p> <p>出版社 ／Publisher</p> <p>ISBN ／ISBN</p>

	その他 ／Other	特に定めない
履修上の注意・準備学習等（予習、復習） ／Notes on Enrollment, Preparation (Pre-class, Review)		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。
学習上のアドバイス ／Study Advice		
関連ホームページ ／Related Websites		
その他 ／Others		
研究室電話番号 ／Office Phone Number		
授業使用言語 ／Language of Instruction	日本語	
優評価「上位 3 割」適用科目 ／Course Subject to the "Top 30% for A Grade" Rule	適用しない／Not apply	
<u>後期教養教育科目</u> ／Liberal Arts Education for Undergraduate (Senior Division) & Graduate Students	該当科目でない／Course not applicable	
LMS 連携有無 ／Link to LMS	LMS 連携有／Link	
オンライン授業 URL ／Online Class URL		
オンライン授業内容 ／Online Class Information		
授業実施形態 ／Course Delivery Method (Format)	オンライン型（オンラインのみで実施）／Fully Online: All classes conducted online	
BYOD における注意事項 ／BYOD (Bring Your Own Device) Policy and Notes		