

大学院特別講義

演題: 分子シミュレーション解析の研究利用

講師: 富山大学大学院総合医薬学研究科 計算創薬・数理医学講座 教授

高岡 裕 先生

日時: 2024年11月8日(金) 16:00~17:30

場所: 第1臨床講堂

要旨: 病態解析や創薬研究へ分子シミュレーション解析を利用することは、計算機の性能の向上から現実的選択肢となった。特に研究費やマンパワーの制約が大きいアカデミアでは、この手法は重要となる。実際、我々の研究チームは人員が少ない(神戸大時代は3名)が、計算機で複数の研究を同時並行的に進めていく効率化も実現してきた。解析には、研究室のワークステーションを使う場合もあるが、計算規模が大きい場合は富嶽のようなスーパーコンピュータを利用することで解析時間の短縮も可能である。これらの最終目標は、「仮説検証型の医科学研究」を『予測確認型の医科学研究』へ転換を実現することである。

今回は、①核酸医薬の評価[1]、②計算 DR (ドラッグリパーポージング)の研究開発[2]、③疾患病態の予測[3]、④分子シミュレーション解析と数理モデル導出による将来予測(副作用予測と治療予後の予測[4]、コロナウイルスの感染力や流行する変異型の予測[5-7])、等のこれまでの研究成果を提示し、時間が許せば今後の AI との融合研究についても紹介したい。

1. Nature Communications 11:2777, 2020、2. Biomedicines 9(3):249, 2021
3. Nature Genetics 55: 1009–1021, 2023、4. PLOS ONE 14(1): e0225244, 2019
5. Microbial Risk Analysis 22: 100227, 2022、6. Microorganisms 10(10): 2090, 2022
7. Microbial Risk Analysis 25: 100278, 2023

本講義は、大学院医学研究科、医科栄養学研究科、口腔科学研究科の大学院特別講義ならびにクラスターコアセミナー(骨・筋と Ca クラスタ)を兼ねています。多くの皆様のご来聴を歓迎いたします。

主催: プレシジョン栄養学の研究基盤確立を目指す食と栄養研究クラスター

共催: 骨・筋と Ca クラスタ、百代会

問い合わせ先: 臨床食管理学分野 竹谷 豊(内線 7095)