

## 本情報/Basic Information

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／Graduate School of Frontier Sciences
ターム・学期 ／Term・Semester	2025 年度／Academic Year A1／A1
曜限 ／Day, Period	集中／Int
開講区分 ／semester offered	A1A2／A1A2
単位数 ／Credits	2.0
学年 ／Year	M1/M2/D1/D2/D3
他学部履修 ／Available to students in other faculties	可
備考 ／Notes	
主担当教員 ／Main Instructor	広川 貴次、齋藤 裕
教室 ／Classroom	

## 担当教員情報/Instructor Information

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	
伊藤 耕一	メディカル情報生命専攻	教授
浅井 潔	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

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	<table border="0"> <tr> <td style="text-align: center;">日本語用 /Japanese</td> <td>ドラッグデザイン、創薬インフォマティクス、 機械学習</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">英語用 /English</td> <td>drug design, drug discovery informatics, machine learning</td> </tr> </table>	日本語用 /Japanese	ドラッグデザイン、創薬インフォマティクス、 機械学習	英語用 /English	drug design, drug discovery informatics, machine learning
日本語用 /Japanese	ドラッグデザイン、創薬インフォマティクス、 機械学習				
英語用 /English	drug design, drug discovery informatics, machine learning				
授業計画 /Schedule	<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>11月27日 広川 12月4日 広川 12月11日 広川 12月18日 齋藤 1月8日 広川 1月15日</p> <p>【講義内容】</p> <p>広川担当分</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>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</li> </ol>				

	<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  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>
<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・準備学習等</b> (予習、復習) /Notes on Taking the Course/Assignments / Instructions for Preparation and 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。
<b>関連ホームページ</b> /Course-Related Websites	
<b>その他</b> /Others	
<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

<b>授業実施形態</b> ／Course delivery modalities	オンライン型(オンラインのみで実施)／Fully Online: All classes conducted online
--	---