

-----●講演のコンセプト-----

これまで MOE フォーラムにおいて計算機科学者による素晴らしいご講演を聞かせていただき、自分でも使ってみたいと思う研究手法が多くありました。しかし、そのほとんどは私のようなウェット研究者には敷居が高いものばかりでした。

今回の私の研究で取り入れた手法は、MOE のチュートリアルで習った事をそのままを使っているものばかりです。実験計画を工夫すれば、それだけでも非常に強力な創薬手段になります。特にウェット研究者にとって、計算にどれくらい時間をかけるべきかは重要なことです。そのことを踏まえつつ、『硝化抑制剤の構造ベース創薬』の研究についてお話させていただく予定です。

-----