



JAPANESE SOCIETY FOR BIOINFORMATICS

## 日本バイオインフォマティクス学会ニュースレター 第12号

学会ホームページ <http://www.jsbi.org/> Tel:03-5793-4431 Fax:03-5793-4432 E-mail:jimu@jsbi.org

### ◆ C O N T E N T S ◆

[巻頭言].....	1	[国際会議レポート].....	13
[特集:バイオインフォマティクスコミュニティの新潮流].....	2	[学会からのお知らせ].....	17
[研究会の活動報告].....	7	[学会議事録等].....	18
[リレー紹介:日本のバイオインフォマティクス研究室].....	11	[学会の現況].....	19
[GIW2005受賞者の声].....	11	[編集後記].....	19

## 卷 頭 言

### —「バイオインフォマティクス司書」資格の提案—

バイオインフォマティクスというと、どのような新しい効率的な解析法を開発するか、というアルゴリズムやソフトウェア開発のことに目が行きがちです。しかし、ライフサイエンス・データベースを構築し、それを解析する作業は、統合化されることによって新たな学問的発見が行われるだけでなく、その応用として、例えば製薬企業や医療関連企業における研究開発・企画や特許関連の実務においても極めて重要です。このようなキュレータ(データ編纂士)によるデータ収集や、アノテータによるアノテーション作業については、実際に事業を行っている方々にはその重要性が良く認識されておりますが、日本の社会全体にも良く理解されているとは必ずしも思われません。

ところで、今は状況もずいぶん変わっているのかもしれませんのが、小学校から大学にいたるまで、各学校には必ず図書室が設置され、そこには司書という職業をもつ方々(私の記憶では、皆、女性で優しい方々だったように覚えております)が、専門職として働いております。キュレータおよびアノテータと呼ばれる方々の職業は、ライフサイエンスの研究開発における、この司書の役割に対応すると言えるでしょう。しかし、本来の図書館司書が文科系の職業であるのに対し、キュレータおよびアノテータという職業には、単なるパソコン利用技術以上の情報科学知識とライフサイエンスに関する専門知識も必要とされ、理科系の職業であると考えられます。残念ながら、日本ではこれらの作業に関わる方々に対する社会的な名称が与えられておらず、公的な資格も特にありません。

そこで、この「バイオインフォマティクス司書」の職業に対する公的

な資格を、日本バイオインフォマティクス学会が認定試験の上で与える、ということを提案したいと思います。社団法人バイオ産業情報化コンソーシアム(JBIC)では、本学会などの共賛を受けて、バイオインフォマティクス技術者認定制度を制定し、既に多くの方がその資格を取得して活躍しております。現在の技術者認定の2級のスキルをさらに特化し、バイオデータ編纂士とかバイオデータ・アノテータという資格を作ることができますと、日本国内に新たな職業を生み出せますし、その即戦力としての需要は少なくないものと思われます。また、大学では、たとえば生物系の学生にバイオインフォマティクスの授業を行う際、どのようにデータベースやプログラムを利用するかというが多く、必ずしもプログラミング実習までは含まれないことが多いと思います。このような授業を受けた学生でも、そこで学んだ知識や技術を応用して社会で活躍する職業が受け皿として用意されていることは、授業に対するインセンティブを与えることになります。バイオインフォマティクスの裾野を広げ、その人材養成の結果をさらに社会へ浸透するには、「バイオインフォマティクス司書」資格認定制度は、現行のバイオインフォマティクス技術者認定制度をさらに多くの方に広げる可能性を持つ案と思うのですが、皆様は、どのように思われますか。



中村 春木(大阪大学蛋白質研究所)

## [特集:バイオインフォマティクスコミュニティの新潮流]

### CONTENTS

- 編集にあたって
- 川路英哉 NTTソフトウェア株式会社
- バイオインフォマティクスの扉を開き、裾野を広げるKNOB
- 二階堂愛 埼玉医科大学ゲノム医学研究センター
- 次世代バイオインフォマティクスツールを目指して -G-language Project-
- 荒川和晴 慶應義塾大学先端生命科学研究所
- BioRubyとオープンバイオ研究会発足前夜
- 片山俊明 東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター
- JSBiとそれに属する研究者に望むこと
- 坊農秀雅 埼玉医科大学ゲノム医学研究センター
- ゲノム情報利用ワークショップとか、やってます
- 中村保一 かずさDNA研究所 植物遺伝子第一研究室

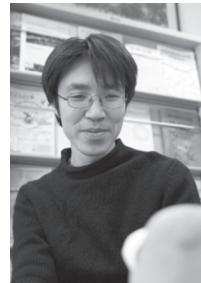
### ■ 編集にあたって

#### 川路 英哉 (NTTソフトウェア株式会社)

昨年の12月パシフィコ横浜の会議室にて、あふれんばかりの人々が見つめる中、ターミナルに塩基配列が螺旋を描きながら表示されるのがプロジェクターで映しだされていた。GIW2005のBoF(Birds-Of-A-Feather)として開催されたオープンバイオ研究会(<http://www.open-bio.jp>)の1コマである。たわいもない上記のようなアプリケーションを間に挟みながら、研究をより円滑にするためのツールやデータに対する新しい視点が披露された。研究として既に形になったものだけでなく、より良い研究をより楽しく行う上で必要となるであろうツールやアイデア達である。

バイオインフォマティクスやこれを利用した研究を進める際、データや既存の手法を理解し、適切な方法で解析を進めるべきであるのは言うまでもない。しかしながら検討すべきデータの種類や量、解析手法は増加の一途を辿っており、出版物や論文ではカバーしきれない部分も数多い。これを補う上で有効な手段の一つが、様々な形での情報交換である。手法やツールの開発者とユーザの情報交換はもちろん、同様の問題を抱えた者同士での情報交換によっても、カバーされ得る問題は数多く存在する。もちろんGIWのような国際会議や既存の各種研究会は主要な情報交換の場の一つであるが、焦点は主に成果の発表であることから、実用的な面での問題点やノウハウが明示的に議論される場面はそう多くない。特に、バイオインフォマティクスの成果を実際に利用する機会の多い、ウェットな実験を行う研究者に対しては、適切な情報交換の場がそう多くないというのが現状であろう。その他、分野外への研究成果の発信も近年重要視されつつある項目の一つであるが、この点においても、主に専門家が集まる既存の研究会が有効な解決策となるのは難しいと考えられる。こういった状況に対する現実的なアク

ションとして、有志によるいくつかのコミュニティが形成されつつある。様々な問題を抱えるもの同士が情報交換する場として、もしくは共同して現実的なアクションを起こす場としてのコミュニティである。冒頭で触れたオープンバイオ研究会は、こういったコミュニティの一つであり、バイオインフォマティクスにおけるオープンソース・ソフトウェアの利用・開発に焦点をあてた情報交換・共同作業が行われている。



本特集ではこういった、既存の研究会ではカバーしきれない領域に焦点をあて、活動を行っているコミュニティを取り上げる。二階堂さんからはバイオインフォマティクスの裾野を広げることの重要性とこれに対する実際的なアクションを、荒川さん・片山さんは自身で開発されているツールを含めたオープンソース・ソフトウェアとその状況を、坊農さん・中村さんは研究者によるコミュニケーションの重要性とそれに対する問題意識・実際的なアクションを、と多岐に渡る内容について、ご自身の活動を交えながら忌憚のない意見を述べていただくことができた。読者の方とは意見を異にする部分があるかもしれないが、「より良い研究をより楽しく行いたい」というモチベーションの下、様々な試みがあり、様々な問題意識と期待があることは読み取っていただけるのではないだろうか。しかしコミュニティは人間同士のつながりがあるので、自ら飛び込んでみると実感するのが難しいという側面もある。本特集で少しでも興味をもたれた方、もしくは問題意識を共有する方々がいらっしゃれば、ぜひ自らとしても参加する・行動を起こす等していただければ、編者としてこれに勝る喜びはない。

### ■ バイオインフォマティクスの扉を開き、裾野を広げるKNOB

#### 二階堂 愛 (埼玉医科大学ゲノム医学研究センター)

「配列解析のツールを購入しようと思っています。何か良いソフトをご存知ではないですか?」。以前私がいた研究室のメーリングリストで流れたメールの1文である。当時、博士後期課程の学生だった私はこんな返信をした。「EMBOSSというフリーでソースが公開されている配列解析ソフトがあります。こちらを試されてはどうでしょうか?」。

ここでEMBOSSについて少し紹介したい。EMBOSSはGCGのようなコマンドベースの配列解析プログラム集で、GPLで公開されている。現在、160以上のプログラムからなり、その機能は核酸やタンパク質の簡単な編集、アライメント、モチーフ検索、siRNAの設計など多岐にわたり、商用ソフトを遥かに超える機能を備えている。さらにGUIやWebベースのインターフェイスも用意されておりコマンド

操作になじみのないユーザーにも使えるよう工夫されている。

さて、結局、「EMBOSSを使えば?」という私の意見は以下の2点で却下された、1)EMBOSSのドキュメントは非常に充実しているが、英語であるためテクニシャンや修士の学生が使いづらい。2)コマンドベースのプログラム集は使いにくく、インストールや設定ができない。ウェットな学生に対しては教育コストが高い。

つっこみどころはたくさんある。しかし、私はその問題を議論するのではなく、2つの行動を起こすことにした。ひとつは、すぐれた英語のドキュメント(特にEMBOSSのドキュメント)を翻訳すること、そしてもうひとつは、簡便にバイオインフォマティクスのツールを利用できる環境(特にバイオインフォマティクスのツールが設定済みの1 CD Linux)をつくることである。前者は当時、ちょうど、日本新薬株式会社の多賀谷さんがEMBOSSの翻訳プロジェクトJAMBOを立ち上げたところだったのでそこにコミットすることにした。現在、「チュートリアル」「管理者の手引き」などのドキュメントの翻訳を完了しており、その成果はWebで公開されている(<http://jambo.sourceforge.jp/>)。後者に関しては、KNOB Project (<http://knob.sourceforge.jp/>)という活動を開始した。KNOB(ノブ、Knoppix for Bio)とはバイオインフォマティクスのソフトウェアが設定されたLinuxのディストリビューションである。KNOBはKnoppix JP (<http://unit.aist.go.jp/itri/knoppix/>)という1 CD Bootable Linuxをベースとして作っている。そのため、ありふれたWindowsコンピュータのCD-ROMドライブにKNOBが入ったCD-ROMをいれて再起動するだけで、Linuxが起動し、簡単にバイオインフォマティクスの解析や学習が利用できる。もちろん、もとのWindows環境には一切影響を与えない。KNOBは無償で配布しており、アカデミアだけでなく、企業での使用も自由である。

しかし、CDで提供されているデメリットもある。バイオインフォマティクス研究に欠かせないデータベースが収録できないのである。KNOBではこの問題を解決するためにWebサービスを積極的に利用し、必要なときにインターネット上のデータベースを自動的に参照する仕組みをもっている。それぞれのプログラムからユーザーが意識することなくDNA/タンパク質配列を自在に利用できる。ま

た、バイオインフォマティクスではしばしば大量の計算が必要になる。理化学研究所の小西史一さんがKNOBを改良し KNOB High Throughput Computing edition ([http://big.gsc.riken.jp/index\\_html/Members/fumikazu/htc](http://big.gsc.riken.jp/index_html/Members/fumikazu/htc))を作成しており、ジョブ管理システムや共有ファイルシステムが設定された分散コンピューティングが簡単に利用できる。

KNOBの機能でなく利用場面に目を当ててみると、バイオインフォマティクス初学者や実験生物学者に向けた教育教材として、KNOBが使われて始めている。例えば、慶應大、医科歯科大での講義で使われており、私も、JSBiが協賛している財団法人神奈川科学技術アカデミー開催のセミナーやかずさDNA研究所で行われた「生物学者による情報処理技術研究会」のハンズオンセミナーなどで、実験生物学者に向けた講習をおこなってきた。KNOBはバイオインフォマティクスへの扉を開き、その裾野を広げるために貢献していると言えよう。

このように、研究者が実際に現場で使っている解析環境が簡単に誰でも手に入れられると、研究者以外の人たちも我々の研究を追試し、新しいアイディアを試すことができる。天文学や分類学などではアマチュア研究者が新しい星や新しい種を発見するといったことは当たり前のことだ。同じように、新しい遺伝子を発見するアマチュア研究者がでてくるかもしれない。ITの世界では10代の若者がすぐれたソフトウェアを作り成功している例もある。

アウトリーチが叫ばれる今日、教育講演やポータルサイトのような活動の重要性は疑いない。さらに、興味を持った人がバイオインフォマティクスを体験できる扉があれば、ある人はこの世界に飛び込み、ある人はエバンジェリストとしてこの分野の有用性を周囲に説明し、ある人は科学の清浄性を保つために追試に励むかもしれない。KNOBのような草の根活動はバイオインフォマティクスの裾野を広げ、結果的には人材の流入を促進し、業界を盛り上げ、血税を投入するにふさわしい学問であることを一般の皆様に理解して頂くために、いくばくか貢献できるのではと、淡い期待を抱いている。



## ■ 次世代バイオインフォマティクスツールを目指して—G-language Project—

荒川 和晴(慶應義塾大学先端生命科学研究所)

2001年。コンピュートゲノムが爆発的勢いで次々と読み取られる様子とまるで競い合うように、様々なアルゴリズムを実装したバイオインフォマティクスツールが開発・公開されていった。それらソフトウェアの中にはバイオインフォマティクスという分野の成熟を窺わせる優れたものも多数存在した。だが、「ドライ」な生物学も「ウェット」な実験主体の生物学と同様に、様々な手法を目的に応じて組み合わせることによって始めて研究になるのであり、実行環境も仕様も千種万様なソフトウェアに囲まれていては実験プロトコル(解析パイプライン)を構築するのも容易ではない。そんな中、Perlという言語の上で様々なツールやデータベースを統一的に扱えるようにするBioPerlプロジェクトは有望な解決策に見えた。しかしながら、実際に使ってみるとBioPerlはプログラミングの知識があっても複雑で面倒な作業が多い。データベースに応じて利用するAPIを選ぶ必要があり、結果もまた用意されたオブジェクトから取り出さねばならな

い。「バイオ」と「インフォマティクス」の間には依然として深淵が横たわっていた。



私が慶應義塾大学先端生命科学研究所においてG-language Projectを立ち上げたのはまさにこのような背景に基づいている。バイオインフォマティクスの統合環境として開発しているG-language Projectではデータベースの形式やデータ型を問わずたった一つのインターフェースで扱い、その他の部分はシステムが自動判別及び解釈を行う。実装されている200以上の解析のほとんどはプログラミングを必要とせずにGUIから実行可能であり、結果は一目見て解釈できるようグラフィカルに出力される。当然GUIで出来ることはまだ限られており、G-language Systemの真価を發揮する為にはプログラミングは不

可欠な状況ではあとの、必要なプログラミング作業は最小限にとどめることができるようにG-language Systemは設計されている。BioPerlもその後エントリーレベルのインターフェースを提供するようになり、EMBOSSやTavernaを始めとする様々なプロジェクトもパイプラインの構築を容易にするインターフェースを備えるようになってきている。だが、SmallTalk言語のように解析プログラムと開発環境が一体化し、最小限のコーディングで高度な解析を行えるシステムという点ではG-language Projectはまだ類を見ないツールである。バイオインフォマティクスは計算機を用いて研究を行うというその性質上、自由度の高い研究を行う上でプログラミングは欠かせない。一方で、あくまで我々が興味を持って取り組む対象は生物であり、よってバイオインフォマティクスによる研究においては「インフォマティクス」の部分に関して楽することを前提とすべきであり、バイオインフォマティクツールは対象である生命現象に集中できるようサポートすべきである。

G-language Systemはまた、GNU GPLというフリー(自由な)ソフトウェアライセンスの下で公開されている「オープン」なソフトウェアでもある。既にLinuxなどの成功により幅広く知られるようになったが、オープンなソフトウェアであるということは、単に無償で入手できたり、ソースコードが開示されていたりすることだけを意味せず、「伽藍とバザール」モデルで知られるインターネットを利用したダイナミックなバザール型開発が出来る点、既存の優れたフリーソフトウェアと組み合わせることが出来る点、そしてある程度の知識があれば自らソフトウェアを改変して自分が使いやすいようにカスタマイズできる点など、多数の利点を持つ。だが、科学研究においてはソフトウェアがオープンであるということは殊更に重要な意義を持つ。科学の方法論においては追試及び実証可能性が不可欠であるが、コンピュータソフトウェアを用いたバイオインフォマティクスなどの研究において、使用されたソフトウェアがオープンでなければ、それは即ち手法そのものがブラックボックスであることを意味する。用いられた手法が、ソフトウェアのバグの有無を含め、検証可能である為に、科学研究で

用いられるソフトウェアはオープンでなければならない。

2005年6月にデトロイトで開催されたISMBのサテライトミーティング、Bioinformatics Open Source Conference(BOSC)の基調講演で、Jason Stajichは10周年を迎えたBioPerlプロジェクトの総括に終始していた。確かにこの10年間でヒトゲノム計画やEnsEMBLのパイプラインなどにBioPerlが果たした役割は大きく、その歴史は輝かしくもある。しかし、この基調講演はこれからのビジョンを提示しておらず、ヒトゲノム解読によるゲノム計画のマイルストーン達成と共にBioPerlプロジェクトの目的自体もまた達成されつつあることを窺わせた。だが、ゲノム情報が得られた今こそバイオインフォマティクスの役割はますます重要になってきており、ポストゲノムの課題は山積みであると言える。BioPerlとは逆に、KEGGデータベースを用いた解析が充実しているBioRubyや細胞シミュレーションソフトウェアE-Cellと連携可能なG-language Systemなど、日本には特色のあるオープンソース・ソフトウェア開発プロジェクトが存在する。これらは、最初からポストゲノムを見据えたビジョンの下で開発が行われており、日本発のプロジェクトがリーダーシップを發揮できるチャンスである。

しかし日本でオープンソース・ソフトウェアを開発し、これを広く利用してもらうには、米国のそれと比べ明らかなハンデが存在する。それはソフトウェア開発では大抵時間的に1番のボトルネックになりつつも最重要部分であるドキュメンテーションを彼らの2倍、すなわち英語のドキュメンテーションに加えて本気で国内での利用を促すためには日本語版も、容易する必要がある点である。自戒を込めて言えば、どんなに優れたソフトウェアもドキュメンテーションがなければ使いづらいものになってしまう。これを解決するためには、やはり多くの方々の協力が欠かせない。日本のバイオインフォマティクス研究から発信されたオープンソース・ソフトウェアを、国際的なバイオインフォマティクスコミュニティのリーダーとして送り出すため、JSBiやそれに参加されている皆様から積極的な参加・ご協力をいただくことができれば非常に有難い。

## ■ BioRubyとオープンバイオ研究会発足前夜

**片山 俊明(東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター)**

2000年の秋にBioRubyの開発を始めてから5年が経過した。BioRubyとは、オブジェクト指向スクリプト言語Rubyのためのバイオインフォマティクス用ライブラリである。BioRubyの開発を始めるまではPerl言語を使っていたのだが、データ構造を配列(@)とハッシュ(%)のリファレンス(\)でやりくりするのに無理を感じていた。そんな頃、知人から当時メジャーになりつつあった国産のRuby言語を勧められ、ラボの仲間だった中尾さん、奥地さんと一緒にBioRubyの開発を始めたことにした。海外ではすでにBioPerlの開発も進んでいたが、まだライブラリ自体に統一感がなく、必ずしも欲しい機能が揃っているとはいえないかった。そんな状況で英語のドキュメントを読みながら試行錯誤するよりは自分で作った方が楽に感じられた、ということがあった。Perlと同様にテキスト処理に強く、オブジェクト指向が素直に扱えるRuby言語は使いやすく、開発を続けるうちに日々の解析の役にたつライブラリとなりつつあった。一方で、身近なところからは、そんなライブラリの作成に時間をかけても仕方がない、といった声も聞かれた。また、ライブラリ作成の

宿命として、自分では使わないかもしれない部分の作り込みや、できるだけ破綻しないようなデザインを検討するのに時間が取られることがあった。

翌2001年、コペンハーゲンで開催されたISMB学会のSIGであるBOSC(Bioinformatics Open Source Conference)に奥地さんと参加し、BioRubyの発表を行うとともに、BioPerl、Biopython、BioJavaなど、いわゆるオープンバイオとよばれるプロジェクト(オープンソースのバイオインフォマティクスプロジェクト)の発表を聞いた。この時はまだ知らない人ばかりだったが、BOSCの参加者は20~30台の若い研究者がほとんどで、彼らがとても積極的に次の課題を設定しディスカッションしている姿が印象に残った。じつはISMBのあとで、バンクストンのEBIにBioPerlとEnsemblのリーダーであるEwan Birney氏を訪ねることにしていた。そこで彼にBioRubyについて説明をし、BioPerlの今後について色々と興味深い話を聞いたり、BioJavaのMatthew Pocock氏と話をする機会があった。いま思えば、このような人的な交流を持てたことが、後にBioRubyを継続

し国際的に認知されるための大きな転機となった。2001年の暮れも差し迫った頃「Biohackathon Invitation」と書かれた1通のメールが届いたのである。

BioHackathon は、招待されたハッカーだけが参加できるクローズドなミーティングで、企業がスポンサーとなってホテルの会議室などを借り切り、1週間ほど合宿形式でソフトウェア開発を行う、名前の通りハッキング十マラソンなイベントである。第1回目は O'Reilly 社により 2002 年の 1 月にアリゾナ州 Tucson で開催され、日本から BioRuby の代表として参加させて頂いた。初のアメリカがサボテンだらけの荒涼とした地で、知り合いも Birney 氏と Pocock 氏くらいしかおらず最初は非常に心細かった。そんな中で、共通のおまかなかを決めたあとは、プロジェクトごとに何に取り組むかを決定し、期間中にインプリメントする必要があった。いきなり、開発力に加え、かなりの自主性と社交性と英語力を求められたわけだが、日本語で相談できるメンバーがないことで逆に開き直ることができた気がする。Ruby 言語の開発効率の高さのおかげで日々の進捗レポートでも存在感を残すことができ、すっかり打ち解けることができた。

BioHackathon の第2回目は Electric Genetics社により1ヶ月後に南アフリカのケープタウンで、第3回目は Apple社により2003年の2月にシンガポールで開催され、多くの知己を得て思い出深いものとなった。計3回のBioHackathonは、参加メンバーのレベルも非常に高く、オープンバイオの各プロジェクト共通のデータ取得方式 OBDA が策定されるなど、非常に生産性の高いものだった。BioRubyでも、この仕様に含まれるBioRegistry, BioFetch, BioSQLなどの実装を進めたほか、様々な機能拡張を行った。BioHackathonの開催には旅費、滞在費、会場費などで1000万円以上かかるとのことで、その後は残念ながらスポンサーが見つからず途絶えている。

ともあれ、以上のような経緯で海外のオープンバイオのメンバーと交流を持つようになった。そこで得た知見からKEGGの SOAP/

WSDLによるウェブサービスKEGG APIや、Lincoln Stein氏らの GMOD/GBrowseを利用したゲノムブラウザとDASサーバーである KEGG DASなどを開発するとともに、これらのサービスをBioRuby からも利用できるようにしてきた。2003年以降は再びBOSCに参加することで数少ない交流の機会を得ているが、日本からのBOSC 参加者はまだ非常に少ないので現状である。

そのような状況の中、2004年夏のゲノム班会議において、日本でもオープンバイオに関する情報交換の場が欲しい、ということで二階堂さんと意気投合し、GIW2004でBOSCのようなSIGを開催したいという話になった。その後、中尾さんの尽力でGIWの会場をお借りすることができ、念願のオープンバイオBoFが実現した。参加者の熱意は非常に高く、その場で有志による「オープンバイオ研究会」を発足しドメインを取得(<http://open-bio.jp/>)、年数回の会合を中心とした活動がはじまった。

オープンバイオでは、これまでのゲノム解析のためのツールキットから、ウェブサービスやグリッドを用いた統合環境といった次世代のソフトウェア開発に比重が移っている。そこで利用される技術は日進月歩であり、対象分野も配列解析だけでなく、パスウェイやケモインフォマティクス、自然言語処理など多様化が進んでいる。このようなソフトウェア開発にはなかなか予算がつかないものであるが、BioRubyは2005年にChemRubyとともにIPAの未踏ソフトに採択され、その対象を広げることができた。最近では海外のユーザや開発者も増えており、停滞しても途中で開発をやめなくてよかったと思う。

GIW2005で開催した第2回オープンバイオ研究会も盛況に終わり、国内の優れたプロジェクトをいくつも発掘できた。今後も地道な活動を続けBOSCに負けないよう有意義な交流を図っていただきたい。そして、その成果をBOSCに持ち帰り、ポストゲノムにおけるオープンバイオという日本からのメッセージを伝えていければと考えている。

## ■ JSBiとそれに属する研究者に望むこと

**坊農 秀雅(埼玉医科大学ゲノム医学研究センター)**

JSBiはちょうど私が京都を離れた2000年頃にできたと認識している。当時は学生会員として発足当初から参加させていただいている。それから5,6年経ったと思うのだが、私の目から見るとお世辞にも活発に活動してきたとは思えない。この場を借りて私の考えを述べさせてもらいたい。

第一に、外からの視点(バイオインフォマティクス研究者と呼ばれている人以外からの視点)を意識している研究者が少ないのではないかだろうか。社会一般の人からだけでなく、同じ学者仲間であるはずの分子生物学者すら意識している研究者が少ないと感じられる。もっと他の分野の人間と交流し、分かってもらうというオーラを積極的に発していく必要があると思う。この点については、かつてバイオインフォマティクスが新しい研究分野であったころ、15年ほど前に先人たちが苦労して「ゲノム情報」という分野を日本で広めていたころに、多くを学べるのではないだろうか。現在はWWWを通じた情報発信が非常に容易ないい時代であるのだから、研究者全員が研究していることや考えていることにつ

いて、自らのウェブページを開いて発信できるはずである。このような情報発信はJSBiの「広報」の仕事と押し付けるべきでなく、自らが「広報」であるという認識を持ち、進めるべきである。その自らのウェブページは、研究成果として公開されている「データベース」や「ウェブツール」と同じで更新して維持していくかないと意味がない。毎年変化する研究活動と対応するよう、公開するコンテンツを更新することが必要である。昨今、「データベース」や「ウェブツール」が使いづらいことが新聞報道などでとくに騒がれるようになっているが、それに限らず自身の研究についても国の税金に由来する研究費を使って研究した場合には、それをパトロンであるところの国民にしっかりとアピールしていくべきではなかろうか。どうせ分かってもらえないから、という考え方を持つ方もいるかもしれない。しかしそれは責



任の放棄であり、そういった意識を社会的にもオーソライズされた学会組織であるJSBiが主導して変えていくような、そういう形には出来ないものか?

次に、研究者間の「広報」も重要である。つまり、お互いにどういう研究をやっているかと言うことをお互いがきちんと把握するということである。我々はbioinformatics-jpと呼ばれるメーリングリストを、1999年の12月から約6年にわたって主宰してきた。もともとは、当時所属していた京都大学化学研究所金久研究室の同じ居部屋の仲間や似た研究をしていた知り合いと仲間同士の情報交換の場として、当時世にでだしていたフリーなメーリングリストホストサービス(当時egroups、現Yahoo!Groups)を利用して仲間内で始めたのだが、当時は研究者同士の「広報」として比較的良く機能していたと考えている。しかし現在、いつのまにか加入者約千人、投稿されたメッセージ数が累積で三千を超える巨大なメーリングリストに成長した。大学院生などがインターネット検索では見つけられなかつた、自分にとって必要な情報のありかを教えてもらう場として機能することもたまにはあるが、メーリングリスト本体が巨大になってしまったせいもあり、研究者同士の「広報」としての機能が薄れつつある。研究者ではない人も多く参加する巨大メーリングリストであるbioinformatics-jp以外に、オーソライズされた学会組織としてのJSBiが研究者間の「広報」の場としてそれにとってかわる中心を担うことができないだろうか。もちろん、その形としてはメーリングリスト以外にも、現在ではウェブ上の掲示板やチャット、IP電話な

ど、インターネットを介したさまざまなコミュニケーション手段があるのでそれらを上手く活かした研究の交流を進めることが今後の相互の研究発展に必要不可欠だと思う。

最後に、上記のこととも関連しているのだが私自身が非常に危惧していることとして、実際に手を動かしている大学院生や研究員レベルの人の声が全く聞こえないことが挙げられる。かつてゲノム情報チュートリアルという形の合宿型式で他の研究室の大学院生と交流する場があったと思うが、それを引き継ぐ形の場となっている「バイオインフォマティクス夏の学校」などもより多くの希望者を受け入れ、もっと積極的にやっていただきたいと思う。また、実際に手を動かしている人たちを含め、研究者同士が広く交流する場といえば年会になるだろう。しかしGIWがJSBiの年会であり英語で開催されるとなると、大学院生には敷居が高くなってしまい、生の声を聞く場としては年会が機能していないように思われる。上で触れたようなインターネットを介したコミュニケーションが進んでも、最後には実際に「オンラインに」会って話をするというのが人間である以上必要不可欠である。日本の学会である以上、日本語で広く交流できる機会があったほうがいいのではないか?

以上、普段から思っていることを書かせていただいた。我々のような勝手連のゲリラ部隊ではなく、JSBiが「社会的にオーソライズされた集まり」であるからこそ、正しい方向へのアクションを、影響力を持って行使できるのだと期待している。より多くの、よりいろんな立場の人が集う場のJSBiとなることを願ってやまない。

## ■ ゲノム情報利用ワークショップとか、やってます

中村 保一(かずさDNA研究所植物遺伝子第一研究室)

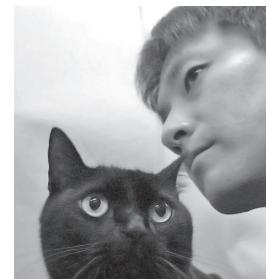
財団法人かずさDNA研究所([www.kazusa.or.jp](http://www.kazusa.or.jp))に勤めてかれこれ10年になる。DNA研は、主として千葉県のサポートにより運営されている非営利研究機関である。われわれの研究グループは、世界で3番目の全ゲノム塩基配列決定となったラン藻*Synechocystis* sp. PCC 6803ゲノムプロジェクトを遂行し(1996年)、高等植物で世界初となったシロイヌナズナゲノム解読国際プロジェクトに参加し、115 Mbのうち約1/4の領域を決定し遺伝子発見を行う(2000年)など、ゲノム研究分野において成果を挙げてきた。

いまや、ヒトをはじめとした多くの生物種のゲノム塩基配列が決定され公開されており、一般の実験生物学者も大量の情報を扱うスキルを身につけてある(あるいは身に着けねばイカンと考え、参考書籍を購入して積み上げてみたりする)ようにはなったが、ちょうどわれわれが大量の塩基配列情報をリリースはじめた10年前から数年間は、もうすこし厄介な状況であった。ゲノム解析が進み、研究材料である生物種のゲノム塩基配列やEST配列情報が自由に取得できるようになった。その情報をうまく活用すれば、たとえば遺伝子塩基配列のスクリーニングを実験的に行なわなくても済むなど、時間短縮や費用の削減など、メリットがある可能性はわかっていたながら、情報処理の技術を持たず、また、その方法を指南する書籍も出版されておらず、途方に暮れた生物学者があまた存在していたのだ。いきおい「ゲノム塩基配列の活用に必要な計算機環境はどのようなもので、どの程度の金額で購入できるのか」「どのようなソフトウェアを使えば扱えるのか」「ソフトウェアはどこからダウンロードしてどのようにインストールするのか」などなど、いくつもの質問がそ

の塩基配列の生産者であるわれわれ宛の電子メールでやってくることになった。

はじめの頃は暇をみては個別の質問に回答していたが、次第に面倒になり、未回答のメールが蓄積はじめ、みるみるフォルダに溜っていった。常に不義理を感じ、酒浸りの日々が続き、ついには着のみ着のまま失踪したり...はしなかったが、誠にストレスフルな日々であった。しかし、そうこうしているうちに、寄せられる質問はいくつかの典型に分類できることに気づく。「配列のユーザ(=実験生物学者)と、この領域の識者に集まってもらい、よくある質問にまとめて答えてしまえば、個別回答の手間が省けるじゃん」。これが1999年に当研究所で開催した「ゲノム情報使い倒し系」の最初の企画である「ゲノム情報利用ワークショップ99—実験生物学者のためのゲノム情報利用相談室ー」の動機となる。

2001年には、でたとこ勝負の若手向け課題もちより企画「ゲノム情報解析技術チュートリアル」を開催、これを機に、生物学者が情報を扱うためのノウハウを共有する場として、メーリングリストを主体とした研究会「生物学者による情報処理技術研究会(通称:infobiologist)」を立ち上げた。このMLは今に統いており、お世辞にも活発とは言えないが、ときおり、投げかけられる技術的な課題質問に対し、それぞれの経験に基づいた実用的な回答がいくつか得られるといった応答のパターンが定着しており、有効に使われて



いると思っている。infobiologistの研究集会は2002年はかずさアーカで、2003年には遺伝研との共催で開催、2005年秋には、ふたたびかずさアーカで、参加者100名を超える規模で「ゲノム情報利用ワークショップ2005」を開いた。講演会とともに、各15名と限られた人数ではあったが、KNOBとMacOSX(二大bioinformatics入門環境だと考えている)を用いたチュートリアルも開催し、好評をおさめた(infobiologistの諸活動についてはこちらからのリンクを参照: [www.kazusa.or.jp/infobiologist/](http://www.kazusa.or.jp/infobiologist/))。

誰に頼まれるでもなくそんな活動をやっているうちに、気がつくと講義やら講習やら書籍の企画を依頼されるようになり、生物学出身の情報処理指南の請負人、といったポジションに棲息することになった。失敗もある。2005年の夏に、京都での生化学若手の会で、アップル社に機材を貸しだしてもらいMacOSXをUNIXとして使おう、といった講習を行ったが、数十人でダウンロードを試みたところいきなりNCBIからアクセスを食らうなど、いろいろと問題があつて予定していた内容の半分もこなせず、見事に撃沈した。

われわれの活動は、あくまでもゲノム情報ユーザとしての「生物学者」をターゲットとして行っている。冒頭に述べたように、われわ

れの研究グループは、日々、ゲノム塩基配列を読み、情報解析を行いアノテーションをつけ、データベースに登録を行っている。そうした「ゲノム情報を生み出しているサイト」としては、ユーザである生物学者にその情報を「使い倒してもらう」ことを希望する。生物学者に活用してもらわなければ、ゲノム塩基配列なんか読んだって意味がない。同様に、生命情報の解析ツールやデータベースを作ってるJSBi学会員諸氏も、それらをもっとユーザである生物学者に知ってもらいたい、使ってもらうためのチュートリアルなどのアプローチを行う機会を積極的にもつべきではないだろうか。研究成果がかたちになっているのであれば、ひろく使ってもらう努力をしなければ自己満足の誇りを免れない。

われわれの「ゲノム情報利用ワークショップ」は今後も続けて行くつもりだ。この夏あたりにまた一度開催したいともぐろんでいる。あなたが有用なツールやデータベースを開発していて、生物学者にアピールしたいと思うのなら、この機会を利用してもらうのも良い。データやツールの生産者、開発者とそのユーザが集まって親睦をふかめ、泊り込みで突っ込んだ議論を行うことで、お互いに利するところが必ずあるはずだ。

## 研究会の活動報告

### ■ システムバイオロジー研究会

主査 松野 浩嗣(山口大学理学部) 副査 倉田博之(九州工業大学情報工学部)

2005年9月2日、理化学研究所横浜研究所交流棟ホールにて「生物系システムにおける遺伝子機能解析」をテーマとして第9回研究会を開催した。参加者は約70名であった。招待講演では、東京大学の伊藤隆先生に「Number to the models」、東京工業大学の下平英寿先生に「階層クラスタリングやネットワーク推定におけるマルチスケール・ブートストラップ解析」のタイトルで講演をして頂いた。伊藤先生は、酵母のプロテオーム研究から、アミノ酸合成制御に関わる精密なネットワークのシミュレーションについて、下平先生は階層的クラスタリングやネットワーク推定におけるマルチスケールブートストラップ解析方法のポストゲノムデータ適用への有用性について話をされた。

一般講演として5件の発表があった。この中ではトランスクリプトーム解析、プロテオーム解析のほかに、タンパク質の構造解析について、情報科学からのアプローチの最新の動向を講演いただいた。

第9回研究会は2006年1月18日にKyutechプラザで、化学工学会バイオ部会生物情報分野専門分科会との共催研究会として開催した。参加者は20名であった。このKyutechプラザは福岡市天神にあり、一般市民との接点として機能している九州工業大学のサテライト教室である。テーマとして「生命システムのモデリング」を設定したところ、招待講演2件を含む、合計7件の発表があった。巖佐先生は、癌化のメカニズムを単純な数理モデルで的確に説明することができることを示された。杉浦先生からは、分子レベルから、心

臓の動的システムまでをシームレスに結びつける数理モデルを発表いただいた。一般講演として、代謝経路、シグナル伝達経路、細胞周期、サーカディアンリズムのモデル化に関するものほか、シミュレーションツールの開発に関するものが発表された。

この研究会も発足して約2年半が経過し、次回で10回を数えることになった。この研究会で所謂常連の方と会うことも楽しみであるが、これまで会ったことのない研究者の方々との交流も毎回あり、システムバイオロジー研究の裾野をひろげ、研究を活性化する場として定着しつつある。本研究会は来年度から新体制に移行する予定であるが、これからも本研究会へのご支援をお願いしたい。

#### —第8回研究会—

2005年9月2日 理化学研究所横浜研究所交流棟ホール

担当運営委員:畠山眞里子(理化学研究所)

#### 『招待講演』

1. 伊藤隆司(東京大学大学院新領域創成科学研究科)

「Number to the models」

2. 下平英寿(東京工業大学大学院情報理工学研究科)

「階層クラスタリングやネットワーク推定におけるマルチスケール・ブートストラップ解析」

#### 『一般講演』

3. 豊柴博義、曾根秀子(国立環境研究所内分泌から乱物質・

環境ホルモンプロジェクト)

「システムバイオロジーの毒性予測への応用」

4. 園田克樹、山根総一郎 (JFEエンジニアリング)  
「時系列遺伝子発現データからのネットワーク予測」
5. 長嶺誠香、榎原康文 (慶應義塾大学生命情報学科)  
「タンパク質間相互作用を用いた協調的転写因子の推定」
6. 岩館満雄、加納和彦、寺師玄記、竹田志鷹真由子、梅山秀明 (北里大学薬学部)  
「3次元構造モデル評価を付加したヒトゲノムタンパク質立体構造データベース」
7. 末永敦、成見哲、沖本憲明、二木紀行、野内涼子、大野洋介、泰地真弘人 (理研GSCシステム情報生物グループ高速分子シミュレーション研究チーム)  
「超高速分子動力学専用計算機のタンパク質機能解析への応用」

#### —第9回研究会—

2006年1月18日 Kyutechプラザ(福岡市)  
担当運営委員:倉田博之(九州工業大学)

#### 『招待講演』

1. 巖佐庸(九州大学)  
「発ガンプロセス:体内でのミニ進化」
2. 杉浦清了(東京大学)  
「分子メカニズムから臨床血行動態までを結ぶマルチスケール、マルチフィジックス心臓シミュレータの開発」

#### 『一般講演』

3. 太田潤(岡山大学大学院医薬学総合研究科・国際環境科学講座)  
「Octave, Matlabを用いる代謝ネットワークの研究」
4. 中茎隆(理化学研究所・GSC)、仲隆(九州産業大学)、島山眞里子(理化学研究所・GSC)  
「ErbB1発現細胞とErbB1/4共発現細胞における上皮細胞増殖因子によるMAPK情報伝達の比較に基づいた数理モデルの構築」
5. 田中寿宜<sup>1</sup>、原田勝行<sup>2</sup>、北風裕教<sup>1</sup>、山中順吉<sup>1</sup>、松野浩嗣<sup>2</sup>、宮野悟<sup>3</sup>(1大島商船高等専門学校、2山口大学理学部、3東京大学医科学研究所)  
「Genomic Object Netにおける計算環境支援ツールの開発」
6. 原田優美<sup>1</sup>、三藤なつ美<sup>1</sup>、藤井靖<sup>1</sup>、松野浩嗣<sup>1</sup>、宮野悟<sup>2</sup>、井上慎<sup>-1</sup>(1山口大学理学部、2東京大学医科学研究所)  
「ハイブリッド関数ペトリネットによるマウスの光刺激応答のシミュレーション」
7. 山道俊介、深野祐哉、倉田博之(九州工業大学・情報工学部)  
「大規模細胞周期ダイナミックモデルのシミュレーションとシステム解析」

※第10回研究会は、3月30日に早稲田大学で開催する予定です。

## ■ 生物情報ネットワーク研究会

主査 堀本 勝久(東京大学医科学研究所)

第6回研究会「計算代数算法の理論生物学への適用」は、2005年11月28日から30日まで富士通ソリューションスクウェア(蒲田)において、「The First International Conference on Algebraic Biology」と、また第7回研究会「情報処理と生物学的意義」は、2005年12月22日に東京大学医科学研究所第一講堂において情報処理学会第3回バイオ情報学研究会とそれぞれ共同開催された。

第6回研究会は、生物情報ネットワーク研究における計算代数の適用可能性を探るために共同で開催した。3日間でplenary talkが1名、invited talkが2名を含む15人の講演者が発表を行い、参加者は3日間のべ約120名であった。講演演題中5題がネットワーク関連の研究であり、目的とした計算代数による生物情報ネットワーク研究の可能性を示唆するものであった。開催の詳細については、会議のホームページを参照されたい(<http://www.ab2005.jp/>)。また、発表論文は、Universal Academy Pressから“Algebraic Biology 2005”(ISBN 4-946443-95-9)として出版された。なおこの会議は、日本バイオインフォマティクス学会の他、the Japanese Society for

Artificial Intelligence, the Japan Society for Symbolic and Algebraic Computation, the Mathematical Modeling and Problem Solving of Special Interest Groups in the Information Processing Society of Japan, Cybernet Systems Co.Ltd. FUJITSU LIMITEDの共催で行った。

第7回研究会は、生物情報学と情報処理でのアプローチの類似点と相違点を認識し、ネットワーク研究における現状打開や今後の研究の方向性決定のヒントを探るために共同で開催した。研究会では、Sequence & structure analysis、Pathway and database、Expression analysis、Text miningのタイトルのもと、14件の発表が行われ、参加者は約80名であった。両学問分野からほぼ同じ問題設定をもつ講演が多くあったため活発な質疑応答があった。今後とも連携を密にし、互いに刺激を与えられる関係を期待している。研究開催において、情報処理学会側の世話人である渋谷哲朗博士(東大医科研)に大変お世話になった。

## ■ 創薬インフォマティクス研究会

主査 白井 宏樹(アステラス製薬(株))

#### ——第4回創薬インフォマティクス研究会活動報告——

開催場所:大手町サンケイプラザ

開催日時:2005年9月2日(金) 10:00-18:00, 懇親会18:00-19:30

<アジェンダ>

<第1部>製薬・化学企業からのtext mining研究への要望

10:00-10:10; 研究会ご挨拶; 白井宏樹(アステラス製薬)

10:10-10:45; Bioinformaticsにおけるtext mining; 西村正利(三共)

10:45-11:20; 創薬におけるtext mining; 佐藤晋(バイオバンク); 元藤沢薬品)

## &lt;第II部&gt;text mining海外製品紹介

11:20-11:35;「一押し」text mining製品紹介(CTCラボラトリーシステムズ)

11:35-11:50;「一押し」text mining製品紹介(菱化システム)

11:50-12:05;「一押し」text mining製品紹介(インフォコム)

## &lt;第III部&gt;情報企業におけるtext mining研究動向

13:35-14:10;日立製作所におけるtext mining;丹羽芳樹(日立製作所)

14:10-14:45;NECにおけるtext mining;麻生川稔(NEC)

14:45-15:20;日本IBMにおけるtext mining;武田浩一(日本IBM)

## &lt;第IV部&gt;アカデミックにおけるtext mining研究動向

15:50-16:25;オントロジー研究会方針

福田賢一郎(産総研)、五斗進(京都大学)

16:25-17:00;Bio-NLP 研究の現状 小池麻子(東京大学)

17:00-17:35;機能オントロジーとデータ統合;高井貴子(東京大学)

## &lt;総合討論・総括&gt;

17:35-17:55;司 会:江口至洋(三井情報開発・JSBi会長)

パネラー:青島健(エーザイ)、仲尾由雄(富士通研究所)、春日孝彦(日立ソフト)

第4回創薬インフォマティクス研究会を第1回オントロジー研究会と合同で開催した。創薬の効率化のために、氾濫しているテキスト情報の有効活用は重要な課題であり、種々のアプローチによる試みがなされている。形態としては、大学で単独に行われている基礎的なものから、情報系企業が主体となって大学や製薬・化学系企業とも連携しながら商品化されているものまで様々といった状況である。しかしながら、今までのところその特徴を、とりわけ創薬における利用価値という観点で横断的に比較したり、評価される機会は稀であった。そこで、1) 製薬・化学系企業、2) 海外製品の導入・販売企業、3) 情報系企業、および4) アカデミック研究

者が一同に会する希少な研究会を開催し、これら四者の壁を越えて多角的な討論を行うことで、目的・ニーズの把握、手法の横断的な評価、先端研究の現状・動向など本分野の全貌の把握を行なうこととした。開催前より多方面からの問い合わせがあったとおり、120名を超える参加者による熱心な議論が行われた。製薬・化学系企業を代表して西村先生と佐藤先生からは、それぞれ現場におけるニーズや現状の問題点を極めて分かりやすく解説頂いた。ニーズの発表なるものを講演してほしいと頼む側は簡単だが、引き受けた頂く側にとってのご苦労は大変であったと思う。本当に感謝に耐えない。また、海外製品の導入・販売企業として3社から製品を紹介頂き、現状での文献・バイオ情報利用の際の有効なツールを把握することができた。いずれも現状での種々の課題の解決を行うには極めて有効で優良なソリューションであろう。そして丹羽先生、麻生川先生、武田先生からは情報系企業で取り組まれている研究動向について大変に紹介頂いた。三社三様の取り組みは客観的に見てそれぞれ特徴があり、現状あるいは近未来における課題の解決を模索する上でそして大変に参考になる講演ばかりであった。最後にアカデミックにおける研究動向についてオントロジー研究会の五斗・福田先生をはじめとし、小池先生、高井先生から行って頂いた。これらの研究動向は、創薬現場においても中長期的なソリューションを展望する上で極めて参考になった。国際的なパスウェイの共通化の話題にも言及され、これは具体的に第2回オントロジー研究会にてトピックスとして扱われた。参加者の方々は、現場ニーズの把握にはじまり、現状、近未来、中長期におけるソリューションについて一定の世界観を構築するのに参考頂けたのではないかと考える。演者の皆様はもとより、パネラー、座長としてご参加頂いた方々、さらには議論に加わって下さった全ての方々に感謝の意を述べたい。

## ————— 第5回創薬インフォマティクス研究会活動報告 —————

開催場所:東京大学医科学研究所講堂

日 時:2006年1月20日 午後1時~6時

トピックス:酵素阻害剤創製のためのBio-Chemo-Informatics  
<アジェンダ>

ご挨拶:白井宏樹(アステラス製薬)

第1部:酵素阻害剤創製のためのChemoinformatics, SBDD  
座 長:松永朋和(持田製薬)

・リガンド-タンパク質のドッキング・シミュレーション

平山令明(東海大学・医学部)

・創晶プロジェクトとバイオグリッドの連携による阻害剤開発に関する研究 井上豪(大阪大学・工学部)

第2部:酵素阻害剤創製のためのBioinformatics

座 長:廣明秀一(横浜市立大学)

・Atomic reconstruction of metabolism (ARM)

有田正規(東京大学大学院・新領域創製科学科)

・Enzyme catalytic mechanism database (EzCatDB)

長野希美(産業技術総合研究所・生命情報科学研究センター)

総 括:清水良(田辺製薬・日本薬学会構造活性相関部会)

第5回創薬インフォマティクス研究会を日本薬学会・構造活性相関部会との共催で「酵素阻害剤創製のためのBio-Chemo-Informatics」をトピックスとして開催した。酵素阻害剤の創製は古くて新しい課題であり、タンパク質立体構造やパスウェイなどをはじ

めとした各種情報が氾濫する中、これら情報を有効活用することで益々の効率化が求められている。そこで今回は酵素阻害剤創製の基盤となるBioinformaticsおよびChemoinformatics(もしくはStructure Based Drug Design)に関する第一線の研究者の方々にご講演をお願いした。

先端的な研究成果に加えて、Informaticsで最も注意しなければならないデータの背景やその質に関する情報も提供頂いた。平山先生のご発表では、普段あまり聞けない蛋白質構造情報を扱う上での問題点を整理して紹介頂いた。これによりドッキング研究を行う際の極めて地道な具体的対応策を知ることが出来た。井上先生のご発表では、新規な結晶化技術による数々の医薬上重要な分子の構造決定が行われていることを伺うことができ、かつインシリコ技術を組み合わせて効果的にドラッグ設計がされている具体例を紹介頂いた。有田先生からは、メタボロミクスに関する世間一般での期待感が実際とは異なって少し拙速すぎる感があるとのこと、大変に分かりやすくご解説頂いた。ショックを受けるとともに、Informaticsを行う上で扱うデータがどういう出され方をしているのか、しっかりと把握しておく必要性を再認識することができた。長野先生のご発表では、酵素の再分類という世界初の試みを極めて地道に行なわれていることを紹介いただいた。生物学と化学の融合がまさにEzCatDBにて実現されていて、これまで出来なかった切り口での創薬研究が行える、基盤整備がなされていると感じた。

研究会を通して、創薬を志向する際、バイオとケモの区別なく、また実験とインシロの双方を組み合わせて効率的な創薬を実現することが重要であることを再確認できた。演者の方々に加え、座長・世話役を引き受けて頂いた方々もまた、日頃からバイオ、ケ

モに跨り、また実験とインシロを常に効果的に組み合わせて研究を推進しておられる方々にお願いをして開催したため、充実した議論を展開して頂いた。

## ■ オントロジー研究会

主査 五斗 進(京都大学化学研究所) 副査 福田賢一郎(産業技術総合研究所生命情報科学センター)

本研究会は「日本からのオントロジー発信」を実現することを目指して今年度から発足した研究会です。今年度は2回の研究会を開催しました。第1回目は9月に創薬インフォマティクス研究会と共に開催されました。第1回目のプログラムは前号のニュースレターに記載されていますので省略しますが、主に化合物や薬の情報のデータベースと文献からの情報抽出について活発な議論がありました。

第2回目は11月18日にBioPAX国際シンポジウムと共に開催されました。BioPAXはパスウェイデータベースのデータ交換フォーマットの国際標準を提言するためにパスウェイ・オントロジーを開発しているコンソーシアムです。本シンポジウムでは日米欧の著名なパスウェイデータベース開発者による招待講演を企画したところ、国内の幅広い注目を集めることができ、173名の方に参加者して頂きました。講演プログラムは以下の通りです。

### Session 1: BioPAX Academic Institutions 1

BioPAX Overview and Applications. Gary Bader (MSKCC)

BioPAX and aMAZE, Comparison of Two Model for Biological Processes. Christian Lemer (Free University of Brussels)

The PATIKA Ontology, Modeling Language and Exchange Facilities. Ugur Dogrusoz (Bilkent University)

### Session 2: BioPAX Academic Institutions 2

Reactome - Knowledgebase of Biological Processes. Imre Vastrik (EMBL-EBI)

INOH Database - Pathway Data and Pathway Ontologies. Ken I Fukuda (CBRC, AIST)

### Keynote Lecture

Chris Sander, Director of the Computational Biology Center, Memorial Sloan-Kettering Cancer Center

### Session 3: BioPAX Private Sector

Millennium Pharmaceuticals Pathway Database Project. Alan Ruttnerberg (Millennium Pharmaceuticals)

Representation of Entities, Interactions and Pathways in the Transpath Database. Frank Schacherer (Biobase)

### Session 4: Pathway Projects in Japan

KEGG for Integrating Genomic and Chemical Information. Susumu Goto (Kyoto University)

ARM Database for Interactive Metabolic Maps. Masanori Arita (Tokyo University)

Pathway Modeling and Simulation on Petri Net Based Formalization. Hiroshi Matsuno (Yamaguchi University)

### Session 5: Systems Biology

SBML and Pathways. Michael Hucka (Caltech)

The BioModels DB. Nicolas Le Novère (EBI)

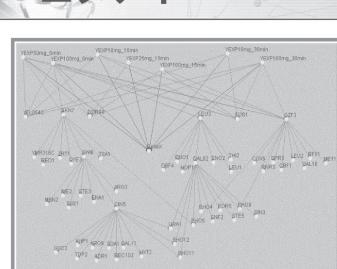
2006年度も引き続きパスウェイ、化合物、反応をキーワードに2回程度の研究会開催を予定しておりますが、トピックを限定するわけ

ではありませんので、テーマも含めて会員の皆様からの幅広いご意見・ご要望をお待ちしております。

## 株式会社ジーエヌアイ

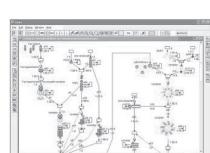
GNIでは、マイクロアレイ技術と独自の解析アルゴリズムを用いて遺伝子間の因果関係を網羅的に抽出し、未知の遺伝子を含んだ「遺伝子制御ネットワーク」を構築しています。

これにより、遺伝子の機能解明と同時に、新規創薬ターゲットの同定と効率的な絞込みを可能としています。



## Cell Illustrator 2.0

代謝系・シグナル伝達カスケード・遺伝子制御ネットワークなど複雑な分子間の相互作用をモデル化することで、シミュレーションを行うことができます。



**GNI**  
Gene Networks International

〒105-0001 東京都港区虎ノ門4-2-12  
虎ノ門4丁目MTビル2号館9階  
<http://www.gene-networks.com>

TEL: 03-5425-6363 FAX: 03-5425-6364

**人材募集** 統計、医、理工学系修士・博士号取得者  
ご希望の方は上記FAX番号へ履歴書・学歴書をご送付下さい

## リレー紹介:日本のバイオインフォマティクス研究室

### ■ 慶應義塾大学富田研究室

木下 綾子(慶應義塾大学先端生命科学研究所)

本研究室では、山形県鶴岡市の慶應義塾大学先端生命科学研究所(IAB)、環境情報学部・先端生命科学プログラムを拠点として、生命が持つシステムの理解と、その医療、環境への応用を目指しています。

生命の現象を、システムを構成する要素の挙動と結びつけて理解するためには、あらゆる階層での要素同定と定量、いわゆるオミクスアプローチによるデータが不可欠です。IABでは、直感的に最も現象に近いレイヤーであるメタボローム(代謝物質)の一斉同定・測定を可能にする、キャビラリー電気泳動質量分析装置(CE/MS)を開発しています。

また特に、大腸菌に関しては全通り遺伝子破壊株(KEIOコレクション)の構築を行い、ゲノム(塩基配列)、プロテオーム(たんぱく質)、トランスクリプトーム(転写情報)、インターラクトーム(分子間相互作用)、メタボロームの全層に渡る生体内のデータを網羅的に収集し、世界でも類を見ないdata-drivenの研究体制が整っています。

一方で、このような網羅的アプローチによるデータを有用なものにするには、膨大なデータを解釈し、「何がどのように起こっているのか」という根本原理を理解する情報科学的、理論的の両側面での基盤が不可欠です。

我々の研究室では、この情報科学的な基盤のひとつとして、ゲノム解析の汎用ソフトウェアG-languageを発表し、また、情報技術を応用して、大量のメタボロームデータから特性を抽出するアルゴリズムやソフトウェアの開発を行っています。メタボロームの測定と解析によって、バイオマーカー探索、食品化学分析などへの広い応用が期待され、すでにベンチャー企業ヒューマンメタボロームテクノロジーズ(HMT)が立ち上がっています。

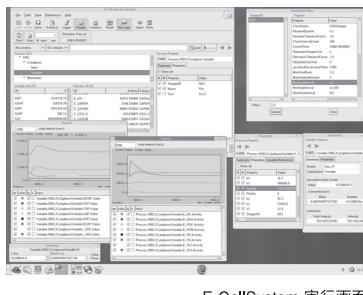
本研究室では、細胞のダイナミクスの根本的な理解を目指し、1996年にE-Cellプロジェクトが発足されて以来、世界に先駆けたシミュレーション基盤の開発が行われてきました。現行のE-Cell System(E-Cell

version 3)では、マルチタイムスケール、マルチアルゴリズムを実現し、あらゆる階層、時間軸における生命現象を効率よくモデル化することが可能になっています。しかし、細胞内の物質局在や構造といった物理的な作用が細胞のシステム的な機能にどのように関わるか、という問題は、これまでの枠組みでは解くことができない反面、その現象の複雑さは計算機の利用なくして理解は不可能です。現在、様々な企業との産学連携コンソーシアムを立ち上げて、インターフェースや解析機能といったソフト面の充実に加え、これらの問題を解決する、革新的な技術基盤の開発が進行中です。

E-Cell Systemで構築されているモデルの対象は、赤血球代謝、心筋、シアノバクテリア概日リズム発生機構、大腸菌代謝、神経細胞成長円錐、ミコンドリア代謝と、多岐に渡っています。特に、赤血球モデル、大腸菌モデルでは、メタボロームデータの取得、シミュレーションによる仮説の提唱、生化学実験による仮説の検証というサイクルが実現し始めています。最近では、慶大医学部医化学教室との共同研究により、周囲の低酸素状態に応答しておきる赤血球内の代謝変動が、血管拡張と、それに伴う効率的な低酸素状態の緩和の役割を果たしている可能性を提唱、検証しています。

このように、実験、情報解析、理論研究、技術基盤の開発と、多彩な研究が展開されているため、私たち学生は、何を研究の対象とし、どのような手法をとるかを考え、選び、時には研究の場所を選んで研究することができます。これは、非常に魅力的な環境だと考えています。

※次回は東京大学の森下研究室です。



E-CellSystem 実行画面



鶴岡タウンキャンパス

## GIW2005 受賞者の声

### ■ The Best Paper Award

受賞論文：“Interaction Graph Mining for Protein Complexes Using Local Clique Merging”，  
Xiao-Li Li, Soon-Heng Tan, Chuan-Sheng Foo, See-Kiong Ng  
“A Great Journey with GIW” Dr. Xiaoli Li (Institute for Infocomm Research)

In the morning of December 18, I left Singapore to attend GIW2005 conference with great excitement as this is the second time that I am attending the GIW conference, but what a wonderful journey it has been! Last year, I was still a freshman in the bioinformatics domain, being a computer scientist who had not yet crossed over into the fascinatingly complex world of biology. I had just joined Dr. See-Kiong Ng's acclaimed bioinformatics team at the Institute for Infocomm Research (I2R) in Singapore because I was excited by the research advances in biology that I have been hearing about since the Human Genome Project, and I was very eager to apply my computer science techniques to help biologists understand the secrets of life. For my baptism in bioinformatics, the wise Dr. Ng suggested that I should attend the GIW2004 conference. He was right, of course, because I learned so much from GIW2004; and a year later, we won the Best Paper Award for GIW2005. Having attended the GIW conference previously, I was well aware of the high standard of the papers presented. As such, you can imagine our surprise when we received an email on December 6 from program PC co-chair Prof Mamitsuka and Prof Reinhart Heinrich who informed us on the good news.

After my return from GIW2004, Dr. Ng began to assign me a number of projects on how to computationally mine the protein interaction networks to discover useful knowledge – this is a main research focus for Dr. Ng's bioinformatics group at I2R. We became interested in the possibility of discovering protein complexes from protein-protein interaction networks. Protein complexes are molecular aggregations of proteins assembled from multiple stable protein-protein interactions. They are biologically very important as many proteins are functional only after they are assembled into a complex. However, while the current high throughput experimental techniques have detected many pair-wise protein-protein interactions, the experimental determination of protein complexes is still a highly laborious task. As a result, relatively few protein complexes have been identified to-date. Given that there are much data on protein-protein interactions but comparatively little data on protein complexes, we wondered whether we could help bridge this information gap by mining for putative protein complexes in the vastly available protein interaction networks. We eventually came out with a graph-based technique, using a novel concept of local cliques to explore the protein-protein interaction network and merging the local cliques found in the networks to find the bigger protein complexes. After some initial disappointments, we began to obtain some promising results on this work around August 2005, and Dr. Ng suggested that we should write up our work and submit to GIW2005. It was a mad dash to meet the submission deadlines (which was thankfully postponed for another week), but of course we are now truly glad that we had made it.

I was very fortunate to work with a very talented and interdisciplinary team: Soon-Heng Tan, a biologist, Chuan-Sheng Foo, who is good in programming and mathematics, and Dr See-Kiong Ng, who is a leading bioinformatics expert with great vision and insights. This turned out to be a good recipe for success as we were able to work out novel solutions for difficult but real problems. Nevertheless, we still feel very fortunate to have been selected because there were many qualified papers in the conference that deserved the Best Paper award.

It is easy to underestimate the invaluable contributions by GIW to the successfully growing field of bioinformatics. Over the years, being the longest running international bioinformatics conference, GIW has continued to inspire and nurture countless aspiring bioinformaticians like me. I salute the tireless efforts of the organizers (especially, Prof Satoru Miyano) of this marvelous conference. For me, GIW was the door through which I first entered into the exciting world of bioinformatics. Now, the award has provided me with an even greater gift of confidence that will help me greatly in my continued journey in bioinformatics. For this, I am truly grateful for the kind considerations of the program committee of GIW2005. GIW, and the beautiful city of Yokohama in December, will always have a treasured place in my heart.

On behalf of my co-authors, let me wish everyone a happy and productive new year. I shall be looking forward to the next GIW meeting, where many more exciting work and achievement will be reported, and which is also where many more young and aspiring scientists will begin their fruitful journey into the exciting world of bioinformatics that will help us understand the secrets of life eventually.



授賞セレモニーでのDr. Xiao-Li Li

## ■ Oxford University Press Bioinformatics Prize

**受賞ポスター :** "A Maximum Likelihood Method for Inference of Spliceosomal Intron Evolution",  
Hung Dinh Nguyen, Maki Yoshihama, Naoya Kenmochi  
Hung Dinh Nguyen (Frontier Science Research Center, University of Miyazaki)

On the afternoon of December 21st, 2005 I had just finished lunch with my supervisor, Prof. Kenmochi, and returned to the poster section of the GIW2005 conference. It was still lunch time and nobody was around. I sat down in a chair away from my poster for a rest. Suddenly, a young man with a camera in his hand came to my poster and was about to take a picture of it. Since I thought that he might be interested in my research, I came over him and offered to explain it. "No, thanks," he said, "I just want to take a picture of your poster because it was chosen by the GIW committee to be awarded the poster prize." This was the first time I knew my poster had received the prize. I was surprised and exited to know this good news.

I just started my research in April 2005 after I received a JSPS fellowship. I work in collaboration with Dr. Yoshihama and under the guidance of Prof. Kenmochi to study the evolution of spliceosomal introns. As we already knew, many spliceosomal introns exist in eukaryotic genes. These introns are extra bits of DNA sequences that have to be spliced out after the genes are transcribed into RNA (and hence the name spliceosomal introns). Two natural questions that should be raised are when did these introns originate and what is their role? These questions are the central subject of the introns-early versus introns-late debate. The introns-early theory proposes that introns already existed at the progenitor (i.e., the last common ancestor of prokaryotes and eukaryotes) to facilitate the construction of the first genes. The introns-late theory, on the other hand, holds that introns were gained late after the emergence of eukaryotes. There is still no decisive answer, and inference of intron evolution from the observed data is vital for resolving this debate.

Since intron sequences degrade quickly but their positions in the genes are well conserved, the pattern of intron position conservation is the most reliable information for such inference. So far, different methods of two approaches, maximum parsimony (MP) and maximum

likelihood (ML), have been developed. Since ML methods are based on a firm statistical theory, they should be preferred to MP methods for large datasets. However, the results to date are contradictory. The difficulty is that we do not know the exact frequency of target sites; a target site is defined here as a possible position for intron insertion. Target sites thereby include all observed sites, plus possible sites that had introns in the past or may have introns in the future. The contradictory of previous ML results are due predominantly to differing assumptions concerning the frequency of target sites for intron insertion.

We address this problem from a novel ML method, in which we treat the frequency of target sites as a parameter requiring optimization. Our model of intron evolution differs from some previous models in that it allows both parallel gains and reacquisition following loss. A log-likelihood function that allows optimization of the frequency of target sites together with rates of intron gain and loss was formulated, and an Expectation-Maximization algorithm was developed to optimize the log-likelihood function.

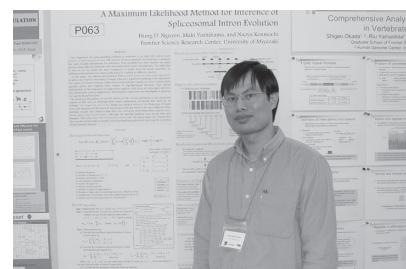
Using the pattern of 10,044 introns (7,221 intron positions) in conserved regions of 684 clusters of gene orthologs from 7 eukaryotes, we obtained results that, on average, there is one target site per ~12 bp. The results of intron evolution inferred using this optimal frequency are proven to be more definitive than previous ML results. Since ML is preferred to MP for large datasets, our results should be the most reliable ones to date. The results show that over evolution there have been slightly more intron gains than intron losses, and thus they favor introns-late (ref. 1).

Our results were further solidified by another independent research of our group (ref. 2). In this research, we tried to resolve the introns-early versus introns-late debate by comparing the exon/intron structures of cytoplasmic ribosomal protein (CRP) and mitochondrial ribosomal protein (MRP) genes, which are supposed to diverge at the progenitor. The results show that, at least, all introns in MRP genes were gained late after the emergence of eukaryotes. Since the intron patterns in CRP and MRP genes are quite similar, all introns in CRP genes were also likely gained after the emergence of eukaryotes. Therefore, our new results also favor introns-late. We believe these results will shed new light on our understanding of the intron evolution.

I would like to sincerely thank all relevant members of the Oxford University Press, JSBi, and GIW2005 committee for their high evaluation of my research. I also want to thank my coworkers, Dr. Yoshihama and Prof. Kenmochi for their significant contributions to the work; all other members in my lab for their helpful discussions; Prof. Yoshihara for his encouragement; and Ms. Rhonda for her help proofreading my English. I want to share this award with my wife, Hang, and my two children, HaMy and Minh, who are always beside me and supporting me during our long stay in Japan.

(1) Nguyen HD, Yoshihara M, Kenmochi N (2005) PLoS Comput Biol 1: e79.

(2) Yoshihama M, Nakao A, Nguyen HD, Kenmochi N (2006) PLoS Genet, in press.



Dr. Hung Dinh Nguyen

## 国際会議レポート

### ■ GIW2005 レポート

#### 山口 類(九州大学大学院数理学研究院)

The Sixteenth International Conference on Genome Informatics (GIW2005)が、2005年12月19日(月)～21日(水)の三日間、大きなクリスマスツリーで飾られた、パシフィコ横浜を会場として開催されました。当会議は、1990年に始まったGenome Informatics Workshopを端とし、1996年に現在の名前に改称され、今年で16回目を迎えたバイオインフォマティクスの分野の中でも歴史の長い国際会議です。

今回の会議では、初日のReinhart Heinrich博士(Humboldt University)、馬見塚拓博士(京都大学)によるOpening Addressを皮切りに、三日間で3件の基調講演、26件の採択論文の口頭発表、166件のポスター発表、11件のソフトウェアデモが行われました。参加人数は555名と発表され、例年に引き続き大変盛況でした。

会議の様子は、筆者は、一昨年に参加して以来の参加だったのですが、まず口頭発表の行われる部屋に入った途端、会場の大きさと、聴衆の密度の高さに、前回と同様に驚かされました。更に、議場からの活発な質問コメントとも相まって、当分野の盛り上がりを感じさせられました。また、発表された論文の扱う対象および手法も多岐にわたり、当分野の幅広さを伺うことができました。一方、ポスター発表も、更に数が多く、大変熱気に溢れたものでした。発表時

間には、並べられたポスターボードによりできた通路が、コーヒーを片手にした多くの研究者でぎわい、それぞれの発表者を中心に関心な議論が行われていました。また、発表時間外にもポスターの前で議論する姿がそこかしこで見られました。タイトなスケジュールの中でも、多くの人の意見をじっくり直接聞くことのできる、ポスターセッションの時間が、二日に分けて、それぞれ長くとられていることは、とてもよいことだと思いました。

基調講演は、初日にPierre Baldi博士(UC Irvine)により“Chemoinformatics, Drug Design, and System Biology”、二日目には、Gunnar von Heijne博士(Stockholm University)により“Membrane Proteins in Vivo and in Silico: Getting the Best of Two Worlds”、最終日には、近藤滋博士(名古屋大学)により“Cell-Cell Interaction Network That Generates the Skin Pattern of Animal”が、各々の題名でなされました。それぞれ興味深い内容で、とても勉強になりました。特に筆者が興味を覚えたのは、近藤博士による、魚のうろこ模様などの動物の体表に見られるパターン形成の要因に関する講演で、モデルと実験が一体となった研究手法による結果は、豊富な例証とともに説得力があり印象的でした。

二日目の夜には、同会場でBanquetがあり、質、量ともに素晴らしい

料理と飲み物が饗されました。そこでは、たくさんの歓談の輪が広がり、旧交を温めるとともに、新たな知己を得たり、情報交換を行うよい機会になっていたことと思われます。また、宴もたけなわになってから、“Best Paper Award”および、“Oxford University Press Bioinformatics Prize”的受賞論文の発表がありました。前者には、Xiao-Li Li博士他による“Interaction Graph Mining for Protein Complexes Using Local Clique Merging”が選出されました。後者は、最も良いポスターまたはデモに対して贈られるもので、Hung Dinh Nguyen博士他による“A Maximum Likelihood Method for Inference of Spliceosomal Intron Evolution”が、選出されました。受賞者代表による喜びのコメントへは、会場より多くの温かい拍手が贈られました。



Dr. Pierre Baldi



Dr. Gunnar von Heijne



ポスターセッション

その後、最終日である翌日も、早朝から、夕方の最後の講演にいたるまで、口頭発表、ポスター発表とともに、多くの聴衆が集まり、最後に閉会および授賞式をもって盛況のうちに会議は幕を閉じました。

発表以外の、会議全般にわたる感想としては、会場の設備の充実もさることながら、会議が円滑に進み運営が素晴らしいということでした。このような運営の裏には、伝統ある会議であることによるノウハウの蓄積と、多くのスタッフのご努力があるものと思われます。会場内で、無線LANのサービスが用意されていたことも、とても便利でした。この会議が、今後多くの国内外の研究者が参加することで、特に若手の研究者、大学院生に刺激を与え、学会と共に大きく発展することを期待します。

## ■ BIOINFO2005

### 「BIOINFO2005 (International joint conference of InCoB, AASBi, and KSBI) 会議報告」 榎原 康文(慶應義塾大学生命情報学科)

アジアで開催もしくは主催されるバイオインフォマティクスの3つの会議、International Conference on Bioinformatics (InCoB), Association of Asian Societies for Bioinformatics (AASBi), Korean Society for Bioinformatics (KSBI) の合同国際会議が、韓国の釜山で2005年の9月22日から3日間開催されました。会議場は、APECも開催されたコンベンションセンターBEXCOでした。APECの開催直前とあって、空港や市内の会議場周辺は多くの警察官がいて物々しい雰囲気でした。

BIOINFO2005に関する統計的な数字としては、論文(概要)の投稿が141件ありその約半分が口頭発表として採択されました。投稿のほとんどは韓国、中国、シンガポール、日本などのアジアからのものであり、わずかに米国と欧州からの投稿もありました。報告者もプログラム委員の一人として査読プロセスに関わりましたが、論文の質は決して高いものではありませんでした。しかし、アジアにおいても広範囲の多岐に渡るバイオインフォマティクスの研究が行われて

いることを実感できました。

参加者の正確な人数は不明ですが、ざっと目算したところでは4~5百人位の規模の参加はあったかと思われます。並列セッションで行われたために、複数の会議室が用意されていて全体として比較的大きな会場でしたが、常に参加者でにぎわっていました。ISMBやRECOMBと比べると質と規模ともに劣りはしますが、バイオインフォマティクスという新しい分野の研究をアジアでも発展させようという熱気と活気は参加者から感じ取ることができて、新鮮でした。

投稿論文の発表以外に、4つの招待講演とSpecial Lectureという3件の発表が行われて、日本からも京都大学の阿久津教授が日本のバイオインフォマティクスのレベルの高さを示す講演を行われました。米国からはMichael Watermanが招待講演者として呼ばれましたが、アジアの若い学生から写真撮影を求められて、まるでスターのようでした。また、山口大学松野教授の研究室の李晨さんと鈴木さんが発表されたペトリネットを用いたシグナルパスウェイ解

析の論文が見事に最優秀論文賞に選ばれました。(彼らのウェブページには、写真つきでBIOINFO2005の会議報告が載っています。ご本人の了解は取っていませんが、ご参考まで。  
<http://genome.ib.sci.yamaguchi-u.ac.jp/gakkai/bioinfo2005/bioinfo2005-li.html>)

最後に報告者の感想として、韓国の釜山は東京から飛行機で1時間半たらずで到着してしまいました。ISMBやRECOMBなどに参加するのにいつものように長時間フライトを経なくても、



中国、台湾、シンガポールなどははるかに物理的に近い距離にあって、人の交流は容易にできると思います。

今回会議を主催した韓国はバイオインフォマティクスの分野にかなり力を入れているようですが、日本もアジアでのリーダーシップを

取って、東アジア圏の研究を活性化させて欧米に向けて研究を発信していくべきではないかという感想を持ちました。

参考URL: <http://biosoft.kaist.ac.kr/bioinfo2005/>

## ■ ICSB2005

### 「ICSB 2005参加報告」

荻島 創一(東京医科歯科大学大学院システム情報生物学)

システムバイオロジーの国際学会であるICSB(International Conference on Systems Biology)2005は、6回目を迎え、2005年10月19日から24日にかけて、アメリカのボストンで開催された。会場はHarvard Medical School(HMS)であった。HMSには、2003年9月にDept. of Systems Biologyが設置されている。参加者は580名ほどで、日本からは20名ほどであった。

口頭発表は1会場で行われ、31演題あり、(1)Biology by Design、(2)Evolution in Action、(3)Intracellular Networks、(4)Dynamics and Multicellular Networks、(5)Mechanics and Scale in Cellular Behavior、(6)Multicellular Networks and Intracellular Dynamicsの6つのセッションから構成されていた。Biology by DesignのセッションのSynthetic Biologyから始まり、遺伝子発現プロファイルからの遺伝子調節ネットワークの推定、およびperturbation実験からのネットワークモデルに基づく薬剤ターゲットの同定、Intracellular Networksのセッションでは遺伝子調節ネットワークの階層的なモジュール構造としての解析、その進化的保存性にまで議論が及んだ。日本からはRIKENの上田泰己博士が哺乳類の概日リズムのシステムの同定について発表した。このほか、Evolution in ActionのセッションではProtocell、E.coliや工学的なロボットの進化実験、Mechanics and Scale in Cellular Behaviorのセッションでは分裂酵母での微小管の運動のシミュレーションや、Santa Fe InstituteのWest博士によるベキ乗則の自然界での普遍性など、実に多様なテーマで

活発な議論がなされた。ほとんどの演題は実験データに基づくもので、実験と理論の両輪での研究が活発になされており、システムバイオロジーが生物学のなかで実質を伴った分野になりつつあることを実感した。

ポスター発表は273演題あり、質、量ともに非常に充実していた。毎晩、口頭発表のセッションの後に、現地ボストンのサミュエル・アダムス、カリフォルニアワインを片手に、白熱した議論が活発になっていた。若手の発表が多く、今後の発展が期待される。Closing remarksはHMSのDept. of Systems Biologyの学科長である、Kirschner博士がシステムバイオロジーの今後を展望して締めくくった。学会の前後にはチュートリアル、ワークショップが併設され、満員が続出するなど、こちらも盛況であった。口頭発表のほとんどは、そのスライドと録画がオンラインで公開されているので、興味をもたれた方はご覧になるとよいだろう(<http://csbi.mit.edu/icsb-2005/>)。次回、第7回は第1回開催国である日本の横浜で開催される予定である。



**infocom**



この15年間、急展開を続けるのライフサイエンス分野で常に最先端のインフォマティクス・ソリューションに取り組んでまいりました。  
これからも・・・

### PROFESSIONAL SERVICE

ソフトウェア開発・共同研究・データ解析サービスは  
**インフォコム株式会社 バイオサイエンス部**

お電話でのお問い合わせ : 03-3518-3860

Eメールでのお問い合わせ : [info-science@infocom.co.jp](mailto:info-science@infocom.co.jp)

ホームページURL : <http://www.infocom.co.jp/bio>

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台3-11三井住友海上別館

## ■ ECCB2005

### 「ECCB2005 参加レポート」 中尾 光輝(産業技術総合研究所生命情報科学研究センター)

第四回目となる2005年のECCB(European Conference on Computational Biology)はJBi(Jornadas de Bioinformatica:スペインのバイオインフォマティクス会議)との合同開催でスペインのマドリードにて2005/09/28から10/01にわたって開催された。ECCB2005ではワークショップ、チュートリアル、学生シンポジウム、キーノート、トーク、ポスター、ソフトウェアデモンストレーションがおこなわれた。各セッションの演題等はECCB2005のウェブサイトを参照されたい。  
(\* ECCB/JBi 2005 <http://www.eccb05.org/>)

参加したときの雰囲気を述べてみたい。採択された論文のトークには30分間のロングトークと10分間のショートトークがあり、それぞれ BIOINFORMATICS誌のフルペーパーとアプリケーションノートに相当している。それらの論文はBIOINFORMATICS誌のECCB2005特集号として出版されている。アプリケーションノートで扱われるような内容を全体会場のトークで聞くのは、たいへん新鮮な印象であった。ポスターセッションでは、JBiとの合同開催であったので、スペインの大学の学生らしい発表が目立っていた。残念なことに、ポスターの掲示は一日だけであり、また、会場がやや狭くてポスターのままでじっくり議論をするという雰囲気ではなかった。(BIOINFORMATICS誌 ECCB2005特集号 [http://bioinformatics.oxfordjournals.org/content/vol21/suppl\\_2/](http://bioinformatics.oxfordjournals.org/content/vol21/suppl_2/))

ECCB2005の会場は、サッカーのスタジアム最寄りの地下鉄Santiago Berunabeu駅から徒歩3分の国際会議場であった。会場の正面におおきなECCBのポスターが掲示されていた。ECCBはポスターなどの印刷物のデザインに力がはいっている。前回のグラスゴーでのISMB/ECCB 2004でも印象的なデザインワークであったと思う。秀逸だったのは、細長い紙を折り畳んでつくられたカードサイズのミニプログラムである。名札にいれて持ち歩けば、分厚いプログラムはもういらないというものであった。今後、ほかの会議でも取り入れられていくことを期待したい。

また、発表者全員に発表証明書を配布していたのが印象的であった。今まで、国際学会を含むいくつかの学会に参加してきたが、そのようなものを受け取ったのは今回が初めてである。

ECCBは基本的にほかのイベントと合同開催(2005年はJBiと、2004年はISMBと)しているようである。その点を留意して参加すると有意義な会議となるのだろうというのが、今回参加してきた印象である。



## ■ PSB2006

### 玉田 嘉紀(統計数理研究所)

1月3日から1月9日の日程でPacific Symposium on Biocomputing (PSB)2006という国際会議に参加してきました。この国際会議は毎年ハワイの島を巡りながら開催される会議で、バイオインフォマティクス関連では最も有名な国際会議の一つとなっています。今年はマウイ島の Grand Wailea Resort & Spa を会場にチュートリアルセッションを含め計 5 日間の日程で開催されました。ハワイはアメリカ本土からだけでなく、日本を含むアジア各国からも距離が近いため非常に参加しやすい国際会議といえると思います。私は過去も数回この会議に参加してきましたが、だんだんと日本からの参加者は減少傾向にあって、代わりに韓国・中国からの参加者が今年は特に目立ちました。

PSBは論文募集に先立って、まずセッションテーマの募集があり、そこで決まったセッションに沿った論文が募集されます。採択されるセッションテーマは時代の要求に沿った物や、これからが期待されるような意欲的テーマのものまであり、採択される論文はそれらのセッション毎に評価されて決まる仕組みになっています。今年は 6 つのセッションテーマが採択されました。我々の研究グループは "Computational Approaches for Pharmacogenomics" というセッションに論文を投稿し、見事採択されました。

会議の日程は比較的余裕をもって組まれているのも PSB の特徴の一つです。特に ISMB や RECOMB などの他の有名なバイオインフォマティクス関連の国際会議と比べて違うところは、各セッション終了後に非常に長い時間のディスカッションセッションが組まれていることです。そこでは各参加者が自由に発言し、思う存分セッ

ションテーマに沿った議論をすることが出来ます。

ポスターセッションは名前のアルファベット順に 2 日間に分かれてランチの時間帯にスケジュールが組まれており、食べ物を手にしながらの開放的な雰囲気のなかでポスター発表が続けます。私も自分のポスターをポスターセッション 2 日目に発表し、多くの人に興味をもっていただきました。

我々の研究グループの論文発表はセッション最終日の 7 日に行われました。このセッションは昨年 2005 年の PSB から引き続き開催されたセッションで皆の興味の高さが伺えます。実際、活発に議論が行われ非常に盛り上がったセッションとなりました。

今年の PSB は 7 日がセッション最終日ということになり、会議に最後まで参加すると、日本に帰国する日が 9 日になります。その日は、日本でもちょうど成人式の連休最終日。しかも最近景気が上向いているせいか年末年始の海外旅行者も増えているようで、私はなんと予約がいっぱいです。ハワイからの直行便の航空機のチケットを取ることが出来ませんでした。仕方なしに結局ロサンゼルス経由で帰ることになりました。非常に有意義な国際会議への参加となりましたが、日本に帰ってきた頃は疲れ果ててしまいました。

来年 2007 年の PSB は、今年と同



じマウイ島で1月4日から8日までの日程で開催される予定です (<http://psb.stanford.edu/>). 論文投稿の締め切りは毎年7月中頃になっています. 開放的な雰囲気の中でバイオインフォマティクスの最先

端に触れたい方は是非論文やポスターを投稿して来年のPSBに参加してみてはいかがでしょうか.

## 学会からのお知らせ

### ■ 平成18-19年度評議員選挙開票結果

平成18年2月6日、選挙管理委員会立会いの下、平成18-19年度評議員選挙の開票作業を行ないました。  
以下の方々に平成18年度より二年間評議員にご就任いただきましたのでお知らせ致します。

北島 正人 ((株)富士通九州システムエンジニアリング)	中井 謙太 (東京大学)
五條堀 孝 (国立遺伝学研究所)	長野 希美 (産業技術総合研究所)
坂田 恒昭 (大阪大学)	平川 美夏 (京都大学)
清水 謙多郎 (東京大学)	福本 淳司 (日本SGI株式会社)
辻本 豪三 (京都大学)	宮野 悟 (東京大学)

会員の皆様の選挙へのご協力に心より感謝申し上げます。

### ■ 平成18年度会員ご継続のお願い

平成17年度は、この3月を以って終了いたします。来年度も引き続きご継続賜りますようお手続きを宜しくお願い申し上げます。

### (独) 産業技術総合研究所 生命情報科学研究センター 人材募集のお知らせ



#### 募集職種

**PD 産総研特別研究員（ポスドク）**  
バイオインフォマティクスに関する研究

**TS テクニカルスタッフ**  
バイオインフォマティクスの各種研究成果データの管理・評価等研究補助業務

#### 応募資格

**PD** 博士号既得者（取得後7年以内）かつ、下記いずれかにあてはまるごとこと。

- ①バイオインフォマティクス研究経験者。  
研究リーダーを目指す意欲のある方。
- ②バイオインフォマティクス研究経験はないが、他分野で優れた研究実績があり、分野転向して意欲的に研究する方。

**TS** いずれかにあてはまるごとこと。

- ①理工系大学の修士卒以上で、バイオインフォマティクス研究に関する業務経験がある方。
- ②高度なプログラミングのスキルを持ち、研究者と協調してソフトウェア開発を行える方。
- ③バイオインフォマティクスの研究現場に携わった経験があり、研究者と協調してデータ解析等研究補助業務を行ったことがある方。

#### 雇用条件

**● 給与** **PD** 時給制 2,200円、2,350円、2,500円

**TS** 時給制 1,100円～2,700円の11段階

**● 雇用期間** 採用予定期～平成19年3月31日  
(年度毎更新、複数回更新可能)

**● 勤務地** 東京都江東区青海2-42 産総研臨海副都心センター別館

**● 勤務時間** **PD** フレックス、1日8時間(5:00～22:00内)  
**TS** 1日8時間(9:30～18:15)以内

**● 休日** 完全週休2日制(土・日)、祝日、年末年始

**● 待遇** 有給休暇、通勤手当、社会保険完備

#### 応募書類

**PD** 履歴書(写真貼付)、これまでの研究概要、  
業績リスト(誌上発表、口頭発表、知的財産権、その他)

**TS** 履歴書(写真貼付)、これまでの業績概要

#### 問い合わせ・応募先

(独) 産総研 生命情報科学研究センター採用事務担当宛

〒135-0064

東京都江東区青海2-42 産総研臨海副都心センター別館10階

Tel: 03-3599-8080 Fax: 03-3599-8081

E-mail: [info@cbrc.jp](mailto:info@cbrc.jp)

詳細: <http://www.cbrc.jp/cbrc/recruit/index.ja.html>

## 学会議事録等

### ■ 平成17年度総会議事録

日時:平成17年12月20日(火) 16:00-16:30

場所:パシフィコ横浜会議センター3階315

#### 1. 総会成立条件について

宮野幹事より総会成立について、現会員数581名のうち193通の議長宛委任状が届いており、総会は1/10以上の出席で成立する規定に従い成立することが述べられた。

#### 2. 本日の議長の推薦について

本総会の議長として現会長の江口至洋先生が推薦され全会一致で承認された。

#### 3. 平成16年度事業報告

江口会長より平成16年度に開催した、総会評議委員会、年会、研究会等についての報告があり、総会の承認を受けた。

#### 4. 平成16年度収支決算報告

宮野幹事より平成16年度収支決算について報告があり、総会の承認を受けた。

#### 5. 平成17年度事業中間報告

江口会長より、本年度の事業として、開催した総会、評議委員会、行った選挙、開催した研究会、地域部会等、協賛後援活動、広報活動、バイオインフォマティクス事典編纂事業、協力事業、海

外との連携事業について江口議長より報告があった。

#### 6. その他

##### 6.1. 地域部会について

東北部会の中山部会長より、東北部会の活動について報告があった。また江口会長より、まだ部会の設立されていない地方における部会の設立に関する検討中であるとの報告がされた。

##### 6.2. バイオインフォマティクス事典について

中井評議員より、バイオインフォマティクス事典についての報告があった。

##### 6.3. 海外連携について

宮野幹事よりInternational Society for Computational Biology、Association of AASBi(Asian Societies for Bioinformatics)との連携について報告があった。

##### 6.4. JSBiホームページ、ニュースレターについて。

松野評議員よりホームページ、ニュースレターにおける賛助会員等の特典について、報告があった。

以上。

### ■ 第14回評議員会議事録

日 時:平成17年12月21日(水) 12:00~13:30 場 所:パシフィコ横浜会議センター3階315

出席者:江口(会長)、中井(副会長)、青島、秋山、有田、小長谷、五斗、榎原、藤、馬見塚(評議員)、蓑島、輪湖(評議員・幹事)、

渋谷(幹事・議事録)、宮野(幹事)

#### 1. Oxford University Press Bioinformatics Prize選考委員会

当賞は採択時にJSBi会員であるポスター投稿者から選ばれるもので、宮野幹事より、その選考規定について宮野幹事より説明があり、投票によって賞の選考を行った。その結果、P063 A Maximum Likelihood Method for Inference of Spliceosomal Introm Evolution, Hung Dinh Nguyen, Maki Yoshihara, Naoya Kenmochiが選ばれた。

#### 2. 平成18年度以降のGIWの運営について

宮野幹事より来年度以降のGIWの運営について報告があった。これまで、GIWについては外部よりサポートを頂き、ポスターセッション及びソフトウェア・デモンストレーションに関してはJSBiの年会として活動を行っているが、来年度は、GIW独自に開催することを検討していることが報告された。さらに再来年度以降には、AASBiのAnnual MeetingとしてGIWを進めて行くことを検討しており、シンガポールでの開催を検討中である。ただし、JSBiも主催あるいは共催、共同開催することによって運営に関わっていくことも確認された。また、プローシーディングの出版に関するJSBiの事業として進めて行く。また出版社に関して、来年度よりWorld Scientificに変更することを検討中であることも報告された。またこれらの変更を検討する際、Medline登録を今

後とも行うこと、JSBiが著作権を持つこと等については変更しないよう検討していくことを確認した。さらに、JSBi年会に関しては2007年度以降どのように執り行っていくかについて今後議論検討していく。なお、これらに関して、来年度の大会委員長については宮野幹事に委任することが確認された。

#### 3. 学会倫理指針について

江口会長および蓑島委員より学会の倫理規定の策定に関する指針について報告があり、早急に案を作成し、今後広くコメント等を集めることになった。秋山委員、藤委員より、バイオインフォマティクス学会にあった倫理を注意深く策定していく必要性について意見が出された。

#### 4. 地域部会について

今後地域独自の活動を増やすために、東北、中部、関西、九州・四国に関して活動・設立等について今後検討していくことになった。秋山委員より、地域部会と評議委員会は密接にやりとりをする必要性について意見が出された。

#### 5. その他

次回評議員選挙等日程について報告があった。

以上。

# 学会の現況

有効会員数(平成18年2月1日現在) 正会員:593名(学生会員100名含む) 賛助会員:37社

## 賛助会員一覧(平成18年2月1日現在)

サン・マイクロシステムズ株式会社  
 日本SGI株式会社  
 CTCラボラトリーシステムズ株式会社  
 田辺製薬株式会社  
 日本ヒューレットパッカード株式会社  
 大日本製薬株式会社  
 タカラバイオ株式会社  
 第一製薬株式会社  
 塩野義製薬株式会社  
 株式会社富士通九州システムエンジニアリング  
 武田薬品工業株式会社  
 三井物産株式会社  
 三共株式会社  
 エーザイ株式会社  
 大鵬薬品工業株式会社  
 株式会社日立製作所  
 株式会社マホレックス  
 アクセルリス株式会社  
 日本新薬株式会社

日本オラクル株式会社  
 三井情報開発株式会社  
 サントリー株式会社  
 中外製薬株式会社  
 株式会社ジー・エヌ・アイ  
 科学技術振興機構  
 インテックW&Gインフォマティクス株式会社  
 伊藤忠テクノサイエンス株式会社  
 日本アイ・ビー・エム株式会社  
 株式会社日立ハイテクノロジーズ  
 インフォコム株式会社  
 東レ株式会社  
 株式会社情報数理研究所  
 株式会社菱化システム  
 サイバネットシステム株式会社  
 味の素株式会社  
 株式会社NTTデータ  
 バイオ産業情報化コンソーシアム  
 アステラス製薬株式会社

## 日本バイオインフォマティクス学会平成17年度役員一覧

会長	江口 至洋	(三井情報開発株式会社)	副会長	中井 謙太	(東京大学医科学研究所)
会計監査	古谷 利夫	(株式会社ファルマデザイン)	諫訪 牧子	(産業技術総合研究所)	
幹事	金久 實	(京都大学化学研究所)	丸山 修	(九州大学大学院数理学研究院)	
	松野 浩嗣	(山口大学理学部)	蓑島 伸生	(浜松医科大学光量子医学研究センター)	
	宮野 悟	(東京大学医科学研究所)	渋谷 哲朗	(東京大学医科学研究所)	
	白井 宏樹	(アステラス製薬株式会社)	輪湖 博	(早稲田大学社会科学学部)	
評議員	青島 健	(三井情報開発株式会社)	秋山 泰	(産業技術総合研究所)	
	金久 實	(京都大学化学研究所)	有田 正規	(東京大学大学院新領域創成科学研究科)	
	北野 宏明	(特定非営利活動法人システムバイオロジー研究機構)	小長谷明彦	(理化学研究所)	
	小森 隆	(インテック・W&Gインフォマティクス株式会社)	五斗 進	(京都大学化学研究所)	
	清水 和幸	(九州工業大学情報工学部)	榎原 康文	(慶應義塾大学理工学部)	
	高木 利久	(東京大学大学院新領域創成科学研究科)	田中 博	(東京医科歯科大学)	
	富田 勝	(慶應義塾大学環境情報学部)	藤 博幸	(九州大学生体防御医学研究所)	
	蓑島 伸生	(浜松医科大学光量子医学研究センター)	西川 哲夫	(株式会社リバースプロテオミクス研究所)	
	森下 真一	(東京大学大学院新領域創成科学研究科)	松野 浩嗣	(山口大学理学部)	
	輪湖 博	(早稲田大学社会科学学部)	馬見塚 拓	(京都大学化学研究所)	

編集後記

今回のニュースレターには新しい試みが3つあります。20ページに増ページのうえ紙面を再構成し、広告を掲載しました。広告主の皆様ありがとうございました。これまで特集の企画を幹事が行っていましたが、今回はNTTソフトウエアの川路さんにお願いしました。読み応えがあります。新企画として「リレー連載:日本のバイオインフォマティクス研究室」をスタートしました。慶應大富田研の木下さんから次回は東大森下研の佐々木さんにバトンタッチです。ご意見などございましたら、学会事務局までお知らせください。紙面がなくなりました。今回のネタは

「オジサンからみた若者のインターネット文化」でしたが、また次回ということで。(松野浩嗣)  
 とにかく、今年の冬は寒いですね。生来、寒がりなたちではないので、これまで冬の間の「ばばシャツ」着用率は週一程度でしたが、今シーズンはほぼ100%のフル出場、連続出場記録更新中といったところです。これは単に厳冬のせいなのか、あるいは寄る年波のせいなのか、考えたくもありません。ただひとつだけ確かなことといえば、毎回毎回天気の話を話題にしている私は、正真正銘の「オバさん」だということです。(鈴木麻子)



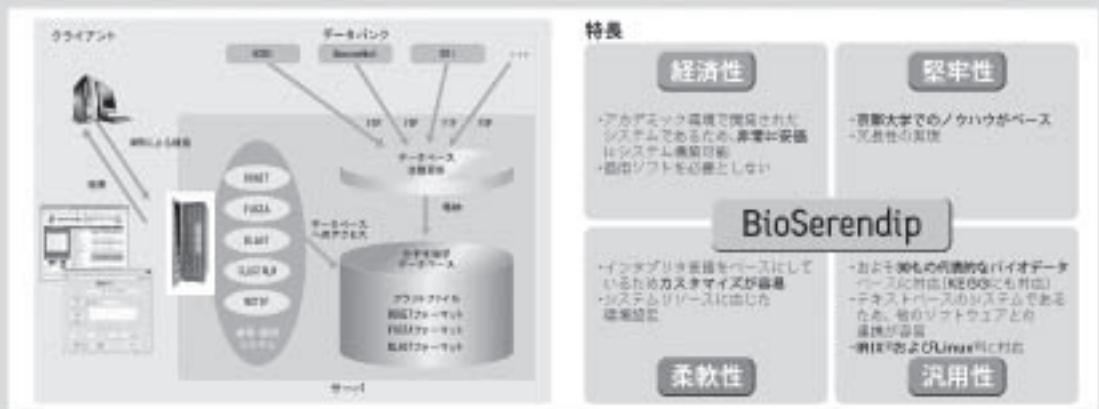
sgt

## 科学分野における計算・解析結果の可視化はコラボレーティブコンテンツ時代へ 日本SGIサイエンス・ソリューション

### ■バイオインフォマティクス バイオ研究支援システム「BioSerendip®」

世界中に数多く存在する遺伝子やタンパク質、モチーフなどの分子生物学データベースはあらゆる研究開発において今や必要不可欠ですが、日々増大する巨大なデータベースを研究者が管理するのは非常に困難となっています。BioSerendip®は、研究開発に必要な分子生物学データベースを自動的に更新することで、研究者に最新のデータベース環境を提供すると同時に、キーワード検索やホモロジー検索、マルチプルアライメント、モチーフ検索など、ユーザー・インターフェースに優れた検索解析ツールを提供することで研究を協力にサポートします。

※BioSerendipは京都大学との共同開発ツールです。



### ■ホモジーモデリング タンパク質立体構造予測ツール「PDFAMs」



ポストゲノム時代において、創薬プロセスではCADD(Computer-Aided Drug Design)が注目されています。特に膨大な数の化合物候補の中からターゲットに適合するリガンド探索には精度のよい構造予測ソフトウェアが必要不可欠です。インシリコサイエンス社は北里大学梅山秀明教授からの技術移転を受けて、タンパク質構造予測の国際コンテストで優秀な成績を収めているプログラムを、PDFAMsシリーズとして商品化いたしました。

※製品の販売及び技術サポートは日本SGI株式会社が行っています。

## 特長

- ホモジーモデリング法による構造予測
- 洗練された立体構造構築アルゴリズム
- 世界でトップクラスのプログラム
- アミノ酸配列を指定するだけの簡単な使用法
- Webユーザ・インターフェース

## ■分子動力学

## MDGRAPE-3による分子動力学計算システム「MDG3-system」

タンパク質の立体構造や創薬などを対象とするライフサイエンス、またナノテクや新規材料などを対象とするマテリアルサイエンスの分野において、分子動力学計算（以下MD計算）は従来より最も重要な研究手法の一つとなっています。しかしながら、数万から数百万個もの原子で構成される巨大な分子を対象とした場合や、さらにそれら分子の運動を追いかけるためには膨大な時間がかかってしまいます。この問題を解決するため、独立行政法人理化学研究所（以下理研）委託真弘人先生を中心に、MD計算専用ボードが開発されました。このボードには、MD計算専用チップ「MDGRAPE-3チップ」（理論性能1850FLOPS）が2枚搭載されており、劇的な計算速度の向上が実現されています。MDG3-systemは、PCやSGI® Altix® 350にMD計算専用ボードを搭載した分子動力学計算システムです。

MDGRAPE-3 搭載 SGI Altix® 350



## 特長

- MDGRAPE-3を搭載
- 高いコストパフォーマンス
- 運用コストの削減

日本SGI株式会社

〒150-6031 東京都渋谷区恵比寿4-20-3 恵比寿ガーデンプレイスタワー TEL:0320-181-086 (フリーダイヤル)

<http://www.sgi.co.jp/solutions/science/>