



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13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].....12
[特集:創薬インフォマティクス].....2	[学会からのお知らせ].....14
[リレー紹介:日本のバイオインフォマティクス研究室].....8	[学会議事録等].....15
[研究会の活動報告].....8	[学会の現況].....19
[地域部会の活動報告・活動計画].....10	[編集後記].....19

## ◆ 巻 頭 言 ◆

## —新任のごあいさつ—

この4月から会長役を仰せつかりました東大医科研の中井謙太です。前任の江口会長がお仕事の関係で二期目続投を辞退されたため、思いがけず、若輩の私に大役がまわってきてしまいました。昨年度は副会長として、江口会長の大変なご努力を間近で見ていただけた、身が引き締まる思いですが、そのお志を継いでいくべく微力を尽くしたいと思っています。会員の皆様方のご支援をなにとぞよろしくお願いいたします。

今さらではありますが、近頃「学会ってなんだろう」と思うことがしばしばあります。私が大学院に入りたてのとき、某学会の会誌のバックナンバーをばらばらとひもといて、面白そうな研究を探してみたことを思い出します。また、はじめて学会の年会に参加して、予稿集を片手に面白そうな発表を物色して回ったときの高揚感を今でもよく覚えています。実際、かつての私にとっての学会は、年会への参加とほぼ同じであり、なぜ学会員になるのかなどと考えたことはありませんでした。しかし、JSBiが設立され、曲がりなりにも学会運営に携わるようになってからは、学会もサービス業として、それぞれの会員が払った会費に見合うだけのメリットを享受できているかを意識しないわけにはいけなくなりました。「学会員であるメリットを高める」ことは、これまでもJSBi執行部でたえず努力されてきたことですが、私もこの目標実現のために出来る限り努力していきたいと思っています。

上述のように、年会の開催は学会にとって非常に重要です。この頃は、研究室の若い学生さんが、かつての私と同様に年会で知的刺激を受けて興奮している姿を見ると、このような知的興奮

をより多くの参加者に感じていただけるようにすることこそ、学会の最大の使命かなとも思うようになりました。これまでJSBiでは年会としてGIWのポスター発表をあててきましたが、来年度からGIWがこれまでに以上で国際化されるのに伴って、少なくともGIWが海外で開催される年には年会をGIWから独立させることになりました。詳細については、今年度の総会などでご報告させていただく予定です。



またJSBiでは、年会以外にもさまざまな活動を行っており、なかでも研究会活動の振興に努めています。さらに昨年度からは地域部会を順次たちあげつつあり、年会への参加が難しい地域にお住まいの会員(特に学生会員)にとって、便利な研究交流の場になるようにしていきたいと考えています。会員以外の参加者からは参加費用をとったり、会に参加してなくても、会員であれば発表資料をインターネットで閲覧できたりするようにすることで、会員としてのメリットを強調していきます。

「会員であることのメリット」は個人会員だけでなく、賛助会員に対しても重要な問題です。実際のところ、JSBiの収入の多くは賛助会費に依存しています。昨年度はニュースレターに賛助会員の広告の掲載を始めました。今年度は(有料で)学会ホームページのバナー広告を始めるなど、さらに知恵を絞っていく予定です。

もちろん学会は単なる会員のためのサービス組織ではなく、学問の振興に寄与していかなくてはならないことは、言うまでもあ

りません。その意味で、6月末に学会創立5周年記念事業として、共立出版から「バイオインフォマティクス事典」を刊行することができたことは、大変喜ばしいことと考えております。執筆や閲読にご協力くださいました会員の皆様には心から御礼申し上げます。その他にも、教育カリキュラムの第2版を作成したり、これまで以上にJBICの「バイオインフォマティクス技術者認定制度」に協力するな

どの努力を行っています。夏の学校も意欲的なプログラムを用意しました。

会員の皆様におかれましては、今後ともJSBiへのご支援をよろしくお願い申し上げます。

日本バイオインフォマティクス学会会長

中井 謙太(東京大学医科学研究所)

## 特集:創薬インフォマティクス

・JSBi会員の方々におかれて、創薬インフォマティクスに興味をもたれている方が増えていると伺い、本特集の企画に至りました。バイオインフォマティクス研究者の立場からみると、ゲノム情報に代表される各種生物情報の解析に適用していた技術を、創薬科学目的への拡大を行う機会であると捉えられており、一方薬学・創薬研究者の立場からみると、実験的手法だけでは限界のある障害を

乗り越える手段が獲得できる機会として捉えられています。体系化されている分野ではなく、捉え方も様々であるため、会員の皆様におかれては、このような多様性をそのまま把握頂くのが適切と考え、いずれも第一線でご活躍中の、背景の異なる6名の先生方にご自由に執筆頂きました。

白井 宏樹(アステラス製薬株式会社、東京医科歯科大学)

### ■ 創薬インフォマティクス分野における多重比較

高木 達也(大阪大学大学院薬学研究科)

「多重比較」という概念を聞かれたことはおありだろうか。臨床医薬学や新薬治験の分野では当たり前になったこの言葉も、Bioinformaticsの分野ではそれほど浸透していないような印象を受ける。もちろん正しい多重比較法が使用されている場合も多いので、あくまで「浸透」しているかどうかの問題なのだが、実のところ、Bioinformaticsにおける多重比較は、少し臨床科学分野における多重比較とは意味合いが異なると、筆者は感じている。

今、外から見えないカップの中に赤球が19個、白球が1個入っているとします。カップの中から球を一つ取り出して、それが赤球である確率は $19/20=95\%$ 、白球である確率は $1/20=5\%$ である。それでは2回繰り返してみる。2回のうち1回でも白球が出る確率は $9.75\%$ と、当然だが、少し高くなる。1回だけで白球に遭遇する確率はそう高くないが、100回も繰り返せば、 $99.4\%$ と少なくとも1回は、まず間違いなく、白球の姿を拝めることになる。このように、当たり前だが、1回では起こりにくい現象も、何度も繰り返せば、1回くらいは起こっても不思議ではなくなる。従って、生物学的な実験データで、対照群と複数の処置群を比較する場合には、どうしても多重比較をしなければ、個々の処置群が有意であるとの主張の有意性が、比較の回数分、弱められてしまうことになる。主張の積極性の水準を保つためには、検定の有意水準を調整せざるをえない。

最も単純なのはBonferroni法で、公称の有意水準(保ちたい積極性)を比較の回数で割った値を、実際に使用する有意水準とするものである。この方法は単純なため、およそあらゆる場面で利用できるのだが、比較の回数が多くなるとつれもなにも検出力が弱くなりすぎてしまう欠点があるため、平均値の差の検定では、Tukey法やDunnnett法などが考案されている。が、近年、標本再抽出法を使った多重比較法が開発されはじめた[1]。当研究グループでも、従来より適用範囲が広く、検出力も劣らない、新規手法を開発した。詳細は文献[2]に譲るが、簡単に言えば、他の標本再抽出法を用いた

多重比較がP値を調整しているのと異なり、Bonferroni法のように、有意水準 $\alpha$ そのものを調整する方法で、より広範な適用性と高い検出力が得られている。この方法は、WWWベースの統計解析プログラムパッケージ、MEPHAS[3]の一部として公開されている。

しかしながらこのような多重比較の考え方(FWER; Family-Wise Error Rate)では、大量のデータの比較を行わなければならない場合は、あまりにも調整された有意水準が小さくなりすぎる。例えば、DNAアレイにより、疾患群と健常群の遺伝子発現量の差異から創薬のターゲット遺伝子を絞る場合を考えてみる。1000個の遺伝子のデータの比較では、 $5\%$ の有意水準を保とうとすれば、Bonferroni法では $0.005\%$ という小さな値で、疾患群と健常群の発現量の差の(或いは比の)検定を行わなければならない。これでは、アレイデータに関して、「積極的」なことは、何も言えなくなってしまうばかりでなく、本当に発現量に差がある遺伝子~ひいては創薬のターゲット分子~を見逃してしまう可能性が高くなる。少なくとも創薬ターゲットの発見において、FWERによる多重比較はあまりにも適切でない。そこで発想を転換して、発現量が異なると検定された遺伝子のうち、本当は発現量が異なるとは言えない遺伝子の比率(FDR; False Discovery Rate)を制御しようという考え方が、Benjaminiら[4]の努力の結果、次第に主流になってきた。紙数の関係で詳細は文献[4]に譲るが、今世紀に入って急速に進展しつつあるFDR制御多重比較の研究が、この分野に、引いては新薬開発に重要な進展をもたらすことを期待している。

参考文献

- [1]例えば、P. H. Westfall and S. S. Young, J. Amer. Statist. Assoc., 84, 780-786 (1989).
- [2]T. Takagi, et al., J. Comput. Aided Chem., 4, 27-34 (2003).
- [3]K. Okamoto, T. Takagi, et al., <http://www.gen-info.osaka-u.ac.jp/MEPHAS/>
- [4]例えば、Y. Benjamini and Y. Hochberg, J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 57(1), 289-300 (1995).

## Fundamental, Structure Based 3D, Clinical QSAR and beyond QSAR

中馬 寛 (徳島大学大学院ヘルスバイオサイエンス研究部創薬理論化学研究室)

従来までの創薬の論理的アプローチとして知られている多くの手法は、一連の薬物分子間の構造類似性に基づくものであり、定量的構造活性相関解析 (Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR) と総称される。QSARの一般形は1960年代にHanschと藤田により提案され、薬効のメカニズムに関する物理化学的知見の獲得および創薬の効率化にその有用性が確認されている。彼らは生体に投与された薬物分子が活性発現に至るまでのタンパク質などの標的受容体までへの輸送過程と薬物-受容体相互作用過程の二つの過程を想定し、Hansch-藤田の一般式を導いたと推察される。前者の輸送過程については、ADMETの定量的予測の第一歩として創薬等におけるその重要性が指摘されているにもかかわらず、原子・電子レベルからの理解には至っていないのが現状である。

薬物分子の輸送過程のパラメータとして用いられている分配係数  $\log P$  に関する電子レベルでの解析は、本稿のタイトルの「Fundamental QSAR」の一例である。他方、後者の過程については、近年の計算科学技術を活用した大規模分子科学計算・シミュレーション技術を用いた薬物分子とその受容体タンパク質との原子・電子レベルでの詳細な相互作用解析が標準に入りつつあり、全系を対象とする分子軌道法計算による解析は「Structure Based 3D QSAR」の一例である。また、従来、QSAR的な考え方がなじまないとされてきた臨床薬学分野において、我々は「Clinical QSAR」を提唱している。

QSARはケモインフォマティクスの源流とも考えられ、我々は新しい情報科学的手法を取り入れたStructure Pattern-Activity Relationship法の構築を上記3つのQSAR研究と並行して行いつつある。また、バイオパスウェイ(ネットワーク)解析とQSARを結びつける新しい分野へのチャレンジを開始している。以下、我々のQSARを中心にすえた最近の研究概要とねらいを紹介する。

### Fundamental QSAR

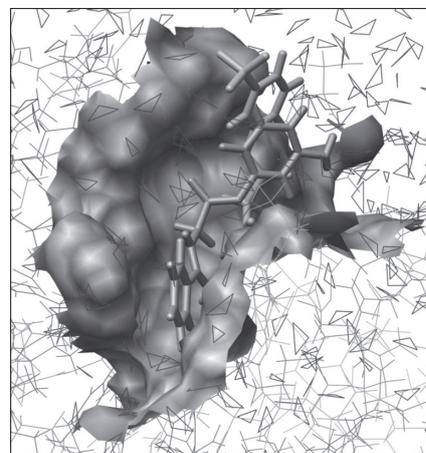
$\log P$ の物理的解釈を明確にすることは輸送過程と薬物-受容体相互作用過程の電子・原子レベルからの解釈・定量的予測につながる可能性があるもののその本質の理解へたどり着くには我々の分配現象に対する理解や知識が乏しいことも認めざるをえない。

近年、溶液中の分子特性を記述するために自己無撞着反応場(SCRF)理論に基づく一連の解析法が提案され、溶媒和自由エネルギーなどの定量的予測に用いられてきている。SCRF法を用いることにより、 $\log P$ を溶質分子の有機相と水相における自由エネルギー差と関連づけることができる。200種類以上の有機分子を対象とした解析の結果、水素結合供与体以外については実測値を定量的に再現することが分かった。ただし、SCRF理論では溶媒を一樣な連続誘電媒体と近似しているため、水素結合のような方向性を有し、かつ局所的相互作用に対する溶質-溶媒系の自由エネルギーに対する影響が連続媒体近似によって正しく評価されているかが問題として残っている。さらに、統計力学的方法(拡張RISM理論)による解析も行っているが、分配現象の分子論的描像を得るのに統計力学的方法アプローチが今後より重要になると考えて

いる。

### Structure Based 3D QSAR

理論・計算化学分野においてここ10年間に於ける最大の成果の一つはタンパク質などの生体巨大分子へ適用可能な非経験的分子軌道法の出現である。近年、ゲノム解析による薬物標的受容体の同定、さらに



パルパイン(活性部位)とN-benzoyl glycine esterとの相互作用

はNMRやX線結晶解析によるそれらの立体構造解析の進展にともない、薬物-受容体複合体の立体構造に基づく電子状態を含めた解析が標準に入ってきた。一方、QSARは、創薬への有用なアプローチであることが今までに実証されてきたが、QSARにおいて生体はブラックボックスとして扱われることが少なくなかったことも事実である。Enzymatic QSARとして現在までに3000以上のQSAR式が集積され、それらのほぼすべてが $\log P$ およびHammett  $\sigma$ などの置換基定数を説明変数として含んでいるが、薬物分子の標的受容体に関する情報は一切含まれていない。そこで、すでに報告されているQSAR解析の結果について、あらたに分子科学計算・シミュレーションによる解析を行い、両者の関係を明らかにすることがStructure Based 3D QSARの第一歩と考えている。この意味で、「Links between Traditional QSAR Approach and Molecular Simulations of Protein-Ligand Binding」が重要と考えている。

HIV-1-プロテアーゼ、パルパイン等とそれらの一連の阻害剤・基質について分子動力学計算、分子軌道法計算(Fragment *Ab initio* MO, LocalSCF)を行った結果、基質の特定部位の電荷移動と電荷の再分配の効果、立体相互作用、および加水分解部位近傍の水和状態が結合自由エネルギーと定量的に相関することを見出し、さらに従来のQSAR式の物理化学的解釈と対応することを確認した。

### Clinical QSAR

医療薬学分野における挑戦すべき新しい領域の一つとしてClinical QSARを我々は提唱している。この一例として、母乳中と母体血漿中の薬物濃度比について、薬物分子の $\log P$ などの物理化学的パラメータを用いた予測についてのQSAR解析を行った。血液中から母乳への輸送過程に関与する因子として薬物分子のサイズ、疎水性、イオン化率などが想定できる。解析に用いた医薬品分子の構造多様性はきわめて大きく、自由エネルギー変化の線型則に基づくQSARの適用が一般には困難となるデータセットにもかかわらず、 $\log P$ 等の分子全体で定まる物性値を用いることにより、臨床データの解析としてきわめて良好な定量的予測式を見

出すことができ、薬物の母乳移行性に関する実用的な予測への展望が拓けた。

#### Beyond QSAR

我々の「薬」に対する知識は常に不十分であり、QSARへのマルチスケール・マルチフィジクスの考え方の導入やQSARと生体系全体の動態(ネットワークダイナミクス)の解析方法を統合したアプローチも重要であると認識している。このような意味においてケモインフォマティクスおよびバイオパスウェイ解析は、今後、創薬における必須の情報解析技術となると予想している。

多層パーセプトロンによるSupport Vector Machineが知識工学の分野で最近注目を集めている。この方法は今までに述べてきた電子・原子レベルからのアプローチとは異なり、分子のトポロジカルな情報を利用した統計的学習機械の範疇に属し、前者のアプローチを補完するものと考えている。この一例として約6000抗ストレス化合物のそれぞれに対応する約20種類の標的タンパク質への分類解析を行い、このアプローチの有効性を確認している。

大規模分子科学計算や分子情報科学的アプローチからの情報およびゲノム情報等を広域分散計算機環境に統合し(「GRIDテクノロジーを用いた創薬プラットフォームの構築 (JST(科学技術振興機構)－ACTプロジェクト)」、創薬および医薬品情報に関する「知識獲得のためのプラットフォーム構築」を最大のゴールとしている。現在、進めているプロジェクト、「フラグメント分子軌道法による生体分子計算システムの開発 (JST－CRESTプロジェクト)」、「医薬品安全性情報コミュニティの構築にむけて (JST－RISTEXプロジェクト)」、「ストレス制御をめざす栄養科学 (文部科学省21世紀COEプロジェクト)」もこの一環であり、このゴールに向かって鋭意努力中である。

上記に関連した最近の文献

1. Hiroshi Chuman, Atsushi Mori, Hideji Tanaka, Chisako Yamagami, Toshio Fujita, "Analyses of the Partition Coefficient, Log P, using *Ab Initio* Mo Parameter and Accessible Surface Area of Solute Molecules", J. Pharm. Sci., 93, 2681-2697, 2004.
2. Zsolt Lepp, Hiroshi Chuman, "Connecting Traditional QSAR and Molecular Simulations of Papain Hydrolysis-Importance of Charge Transfer", Bioorganic and Medicinal Chemistry, 13, 3093-3105, 2005.
3. Kazuto Sato, Hiroshi Chuman, Seiichiro Ten-no, "Comparative Study on Solvation Free Energy Expressions in Reference Interaction Site Model Integral Equation Theory", J. Phys. Chem., B 109, 17290-17295, 2005.
4. Aiko Yamauchi, Hiroshi Chuman, "Data Mining Approach on Clinical / Pharmaceutical Information accumulated in the Drug Safety Information Community", In Complex Medical Engineering, Springer-Verlag, in press.
5. Zsolt Lepp, Takashi Kinoshita, Hiroshi Chuman, "Screening for New Antidepressant Leads of Multiple Activities by Support Vector Machines", Journal of Chemical Information and Modeling, 46, 158-167, 2006.
6. Hiroshi Chuman et al, "Drug Discovery Using Grid Technology", In Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry for Biopolymers, Chapter 12, Edited by E. B. Straikov, J. P. Lewis, S. Tanaka, Elsevier, in press.

## ■ ウェットとドライの狭間で(それは、ぬかるみ?)

金子 周司(京都大学大学院薬学研究科)

筆者の「本業」は、電気生理学という面倒な実験技術を使って機能を測定する膜タンパク質であるイオンチャンネルを対象としたゲノム創薬(のつもり)である。受容体や酵素などの生体分子を対象にする創薬と同じく、ゲノム中に見いだされる新しい遺伝子に着目し、遺伝子産物であるタンパク質の機能解析や発現分布から妥当性を評価し、遺伝子操作や阻害剤の影響から対象となる病態へと研究を進めていく。病態モデルづくりから始まる従来の薬理学的手法に対して、いわゆる新しい逆薬理学的なやり方ではあるが、実際はきわめて実験主導型であり、経験に基づく個別の経験主導型創薬に属する研究スタイルである。膜輸送タンパク質は天然リガンドがほとんど存在しないため、ハイスループットスクリーニングでシード化合物を検索し、それからやっとな対象疾患や標的臓器が見えてくるといっても過言ではない。まして、薬物作用の細胞状態依存性などによって、薬効の定量性すら変動することを知っているだけに、なかなかインフォマティクスに基盤を移したドライな解析には踏み込めない研究が続いている。

そんなウェットな研究の傍ら、10年以上前から「趣味」で作ってきた専門用語のライフサイエンス辞書(<http://lsd.pharm.kyoto-u.ac.jp/>)にも別の意味から次第にハマって来ている。この辞書は研究室に配属される学部生や大学院生に専門英語を教育する必

要から独自に制作してきたものだが、英語、日本語それぞれ5万語を収録した辺りで当初の教育的な目的はほぼ達成されつつある。そこで次は、この辞書を拡張することによって、情報検索をより賢くするセマンティックWebや知識抽出のテキストマイニングに応用できるのではと考え、最近はどうとうシソーラス化に着手してしまった。

とはいえ誰かに作業を任せるでもなく、毎週末にはひとり部屋に籠もって大学院生のバイトさん達が調べてくれた用語を自分で整理するという遅々たる進み方であるため、ゴールは遙か彼方である。MeSHツリーと照合しても用語の階層化は未だに50%程度しか進んでおらず、コーパス解析や用語ツリーの吟味など、しなくてはならない作業が山のようにある。このライフサイエンス辞書の特長は、英語も日本語もコーパス解析によって得られる実際のことばを収録していることである。コーパス解析を行ってみると何よりも驚かされるのは、どちらの言語も表記の多様性が大きいことである。しかも、英語と日本語ではしばしば概念のズレにも直面する。そういった事情を理解した上で、何とか英日2言語を包含する巨大なシソーラスを完成させたいと考えている。

創薬インフォマティクスの観点からは、テキストマイニングによって疾患、遺伝子、化合物などの事象間の繋がりから新しい創薬標的のようなものが見えてくると考えられている。しかし、創薬だけを目標



にするならば、日本語はほとんど必要ない。大半の研究報告は英語で記述されており、日本語中でも新しい概念であればあるほど、英語表記のまま記述されているからである。しかし医療の現場はどうだろうか。教育の場と同じく、医療の場で医療従事者と患者の間で語られる言

語は日本語であり、将来、電子カルテの普及などで様々な日本語文書が蓄積される時代が来ると想像できる。もしかすると有害事象や副作用の発見くらいには日本語の解析は使えるかもしれない。また、情報検索のユーザーインターフェースということに視点を移すならば、何と言っても日本語だろう。

ライフサイエンス辞書は、今はまだ医療文書を解析できるほどの実力はないが、将来、有用な知識発見や情報検索に役立つ資源となることを夢見つつ、今はただコツコツと辞書を構築している。

## ■ 受容体モデリングと化合物探索、私なりの挑戦

広川 貴次 (産業技術総合研究所生命情報科学研究センター)

私は、標的タンパク質のモデリングとリガンドのドッキング、バーチャルスクリーニングによる化合物探索の研究を通じて創薬インフォマティクスに携わっています。具体化には、GPCRやKinaseなど標的タンパク質別に沿ったモデリング戦略を考案しながら、同時にモデリング構造の精度が引き起こすドッキング計算の問題点を克服し、信頼性のあるリガンド/受容体複合体構造をモデリングすることに注目して研究を行っています。ドッキング計算は、大きく、活性ポケットにおけるリガンド構造探索(ドッキング)と結合エネルギーの評価(スコアリング)の2つの過程からなっています。私は、モデリング構造を利用した場合でも、リガンド構造探索については、大抵のソフトウェアは十分に力を発揮していることをいくつかの事例で経験しました。つまりベストスコアの構造に拘らなければ、正しい結合ポーズは、ドッキング結果のある程度の上澄みに含まれているのです。そこで正しい結合ポーズを選定するのに、共通の標的タンパク質にたいして同じ結合能を持つ複数のリガンドのドッキング情報を用いて、ファルマコフォアの共通性を見出す情報処理を加えることでスコアリングのみにとらわれない柔軟な結合ポーズ選定方法(CoLBA法)を開発しました。このCoLBA法を、ヒスタミンH1受容体、ヒスタミンH2受容体(共にGPCR)のリガンド結合モデルに応用し、その結果、変異体実験や活性メカニズムを説明できるリガンド/受容体複合体モデルを予測しました。さらに複合体モデルを使ってバーチャルな化合物ライブラリと本来のリガンドをドッキングさせ、正しいリガンドが識別できるかどうかヒット率を通じて算出することができるようになりました。

ただし、この時期になって私の中でちょっとした心境の変化ができました。例えば、民間企業との共同研究を実施するにあたり、現在の受容体のモデリング構造は、創薬という真剣勝負の世界の中で、その価値に値する精度を持っているのだろうか?インフォマティクス系ができることは、ヒット率の算出まででよいのか?と考えるようになったのです。GPCRは、簡単に構造決定できるタンパク質ではありません。でも化合物をプローブとして間接的に構造評価をすることがインフォマティクス系の立場でもできるのではないかと思います

始めました。それには、実際に活性を測定しなければならず、しかし我々の研究センターではそれは実現できませんし、私にその技術もありません。

この思いをある研究者に相談したとき、受託解析を利用すれば?との案をいただきました。実際に標的タンパク質として一般的なGPCRやKinaseについてはアクセシ系を構築している会社があることもわかりました。化合物についても合成はできませんが、購入可能な試薬ライブラリのカタログを化合物データとして持っておりました。薬学系の研究者にとって、試薬を購入してアクセシ系を用いて活性を測定することは、日常的に行うことなのでしょう。しかし計算機やソフトウェアの発注しか行っていないインフォマティクス系の研究者である私が、インシリコスクリーニングで評価した化合物リストを現物のものとして試薬メーカーに調達し、アクセシ系を有する受託解析会社へ手配するという発想を実際に行動に起こすことは、ちょっとした挑戦でした。さらに当然のことながら、上記は自らの研究費を叩いての解析です。計算機やソフトウェア購入を我慢して費やした費用ですから、「インシリコスクリーニングで選定した化合物の中に結合活性がありますように…」と思う気持ちも一段と強くなりました。また、試薬化合物を調達しようとしたら、製造中止になっている化合物もあるなど、面食らうこともあり、ほんのわずかですが創薬現場の現実を体験する場面もありました。

最近になり、ヒスタミンH1、H2受容体について結果が得られ、H1、H2共にモデリング構造に基づいたインシリコスクリーニングで選定された化合物の約1割が $10\mu\text{M}$ で阻害効果を持つことがわかりました。これらの化合物は公知の試薬化合物ですから、ここから創薬へ結び付けるにはまだまだ多くの難関があります。ただし、受容体モデリング構造の精度を、計算機上だけで算出したヒット率で説明していたときに比べ、実際の活性化化合物が見つかったことで証明することができたことは大きな収穫でした。本研究結果をいくつかの学会で発表させていただきましたが、これまでの計算機によるシミュレーション結果のみを発表していた時に比べ、薬学系の研究者からの反応がとてよくなりました。薬学系の研究者にとっても、

モデリング構造の実用性をより身近に感じてくれたように思います。

もちろん、この戦略が全てではありません。私がインフォマティクス系の立場として、創薬インフォマティクス研究に大切だと思うことは、薬学系の研究者に歩み寄るための工夫を常に考えることだと思います。

ます。購入可能な試薬化合物や受託解析を活用し、自ら予測構造の妥当性を実証に取り組んだのは、あくまで一例に過ぎません。今後も、計算機による結果をよりわかり易く、信頼性を持って伝えられるよう、新たな挑戦をしていきたいと思っています。

## ■ 創薬インフォマティクスとタンパク質間相互作用

太田 元規(東京工業大学)

バイオインフォマティクスの授業などをする時に述べるお約束のくだりに、「2001年にはヒトゲノムのドラフトが決まりました」というものがある。私はそのあと「ヒトゲノムは約30億塩基対と膨大であり、コンピュータの力なくしては解析できません」などと続けて掘みを取ろうと努力する。「ゲノム」という一言は強力だ。90年代中頃にインフルエンザ菌のゲノムが決定してから生物学はゲノムサイエンスの時代へと突入した。科研費配分の点などからしても、ゲノムサイエンス(およびポストゲノムを標榜するXXサイエンス云々)が他分野を席巻していることは明確である。こういった重用のされ方には多面的な意味づけが可能であるが、科学的に重要なことがらに担う社会的恩恵(アウトプット)への期待として、ゲノムサイエンスに課されたものが、ヒューマンヘルスケア、つまり創薬であることは否定できない事実だろう。これはバイオインフォマティクスたるもの、肝に命じておく必要があると思う。

さて、創薬インフォマティクスという学問分野であるが、生命現象の様々な階層の様々な切り口が創薬につながるパスを持っているので、技術的な意味においてはほとんどバイオインフォマティクスと同義語ではないかとも感じる。例えば、あるタンパク質と別のタンパク質の相互作用があるシグナルに重要だとする。これをブロックすると某(人間に悪さをする)生物が困るということであれば、たちまちドラッグデザインのターゲットとなる。要は最終産物として何に価値を見出すかという見方、立場の問題ではないだろうか。このようにバイオインフォマティクスと創薬インフォマティクスが扱う事象の共通性を指摘した上で、現在、私が直面している生物学的問題に話題を移そう。タンパク質Aがタンパク質Bと相互作用するかもしれない、しないかもしれない。両者の配列、構造も既知。ホモログも充分既知。こういう状況下で、タンパク質Aとタンパク質Bの相互作用を議論する際に我々には何ができるのか、もちろんバイオインフォマティクスとしては様々な解析が可能なのであるが、実はそれらの結果はどうもパリッとしない印象なのである(そう感じるのは私だけかもしれないけれど)。例えばドッキング予測をするプログラムがある。それにABをかけた答えは返ってくるのだが、相互作用ということに関しての(私の/我々の?)知識がまだ貧弱なので、微妙な結果について判断ができない。それは相互

作用そのものの一般論として、明快な描像がないことに起因しているのだと思う。例えば1分子の構造形成やフォールディングと対比して考えてみるとわかりやすい。タンパク質の形を見せられた時、二次構造が十分あってコンパクトな形になっているか、疎水核が内にてきていて親水基が外にていでいるか、ループが交錯していないか、などをチェックすると、タンパク質らしいかどうかが大凡判断できる(ディスプレイ領域の場合は別であるが)。しかし複合体を見せられた時に、接触具合が自然かどうかは非常に判断しづらい。

また、そもそも相互作用は静的なものではなく、タンパク質分子同士が近づいた時におそらくぶつかったり離れたりを何度か繰り返したあげく確率的に発生し、そこには多少なりとも構造上の動的変化が生じているはずである。こういった一連の事象を包括的に捉えて初めて相互作用や分子機能というのが語られるはずなのに、構造変化や結合、活性発現といったイベントを連動される試みはほとんどなされていない。

さらに状況を一層困難にしていることの1つとして、タンパク質複合体の構造決定の問題があると思う。一口に相互作用といっても大雑把にそれらは安定な相互作用と不安定な(一過的な)相互作用に分類できる。安定な相互作用は崩れにくいために構造決定も可能であり、事実多くの複合体がPDBに登録されている。一方、一過的な相互作用はその瞬間を捉えて結晶化したり、NMRで安定なシグナルを得たりするのが難しい。しかし、シグナル伝達のカスケードに代表されるような高等生物特有の系に登場する相互作用はほとんどの場合、このような一過的な相互作用が主役となっている。例えばコンピュータが何万倍も速くなって分子シミュレーションが一層日常的になったとしても、タンパク質が働いているその現場を実験的に押さえることができれば、弱い相互作用の一般論にたどり着くことは極めて困難だといわざるをえない。

従って、タンパク質の分子間相互作用の本質的な問題に関して、より多くの観察データが必要であり、また、それらを研究対象とするより多くの参画者が求められている。タンパク質間相互作用を掘り下げていくことで得られる一般的な描像は、創薬インフォマティクスにとっても豊潤な稔りをもたらすに違いない。

## ■ 核磁気共鳴法(NMR)を利用したタンパク質ドメインハンティング

— バイオインフォマティクスと構造生物学の橋渡し —  
廣明 秀一(横浜市立大学大学院国際総合科学研究科)

1 はじめに

筆者が所属する横浜市立大学・大学院国際総合科学研究科・生体超分子科学専攻では、生命の原理を解明する目的で、生体超分子の構成成分としてのタンパク質の構造と機能の研究をおこなっている。筆者は主に核磁気共鳴法(NMR)を用いたタンパク

質の構造生物学研究を行っている。特にマルチドメインタンパク質から、新規ないし構造未知のドメイン(構造ドメイン)を切出して、その立体構造を通じて機能解析を行うという「ドメイン解剖学」に興味を持っている。

2 NMRを用いたタンパク質構造解析の特徴

NMRはもともと、化合物中の原子核(主にプロトン)の核スピンの磁場中で電磁波に共鳴することを利用して、化学構造の決定を行うための分析手法である。近年、タンパク質の立体構造を決定することができることが明らかになってから、タンパク質を解析するための技術が長足の進歩を遂げ、100残基程度のタンパク質の立体構造解析はルーチ的に行えるところまで技術革新が進んだ。X線結晶構造解析と比較したときに、NMRにはつぎのような特徴がある。まず、必要とする試料量及び純度はX線とほぼ同程度であるが、結晶化を待たずに溶液中で立体構造を決定できる。全くの新規フォールドの構造決定に際し、X線における重原子同型置換のような特別な手間を必要としないこともメリットである。一方、欠点としては(1)解析可能な分子量の上限があり、(溶液中での会合状態を含めた)分子量が30kDa以下であるという制限がある。(2)また、試料は $^{13}\text{C}$ 、 $^{15}\text{N}$ などの安定同位体で標識する必要がある。試料調製のコストを下げため、大腸菌または酵母での高効率のタンパク質発現系が構築済みであることが、必要である。

### 3 ドメインハンティングの必然性と実施上の問題点

さて、こうしたNMRに特有の制限、すなわち「低分子量」と「大腸菌で発現可能」の二点から、NMR構造生物学はいわゆる「ドメイン解剖学」と密接な関連をもっている。ドメイン解剖とはタンパク質全長を研究対象とするのではなく、それをドメインに分けるという戦略である。特に新規のドメインの発見・命名と構造決定に特化した研究を「ドメインハンティング」と呼んでいる。構造解析する試料の選択や実験のきわめて初期からバイオフィーマティクスに多く依存する、バイオフィーマティクス主導の構造生物学である。

ところで、新規のドメインの研究に固有の問題点の存在はあまり知られていない。それは、ヒト由来タンパク質から単離したドメインを大腸菌で発現して、それを可溶性のタンパク質として試料調製することがしばしば困難なことに起因する。具体的には、タンパク質が大腸菌の封入体に発現することや、溶解度が低く構造解析可能な試料が得られないことである。タンパク質はドメイン内部の一残基の変異や、ドメイン境界前後の数残基の付加や欠失によって、挙動が大きく変わる。タンパク質のfoldabilityや溶解度を、配列情報のみから予想できるようなツールの登場が、長らく待ち望まれている。こうしたウェット実験に密接に関連したバイオフィーマティクスの方法論を開発するには、情報生物学者と生化学者が緊密な共同研究を行い、予測→検証→予測法の改良、というサイクルをまわすことが重要であると感している。

幸い、筆者らのグループは、比較的小きなタンパク質ドメインの大腸菌用の発現系を構築するのに有効な新しいクローニング法、「PRESAT-vector法」の開発に成功した(文献1,2)。これは、ドメインの試料を得るのに一般的なGST融合発現系やHisタグ融合発現系のプラスミドのマルチクローニングサイトを改変して、PCR産物の方向性クローニングを実現した技術である。この技術により、PCR反応からはじめて最短で48時間で、あるタンパク質ドメインが大腸菌で可溶性画分に発現可能かどうかを判別できる。

### 4 ドメインハンティングの成功例

筆者のグループで、PRESAT-vectorの技術を用いて、実際に立体構造解析に成功した例が現在5例ある。このうち既にPDB登録済みのものが3例、うち2例は論文発表済みであり、残りは現在論文投稿準備中または構造の精密化課程である。PRESAT-vectorの利用が成功した最初の例は、ヒトVps4bのMITドメインの溶液構造

(文献3)である(図1a, PDB:1WR0)。この構造は、残念ながらMITドメインの立体構造として世界初にはなれなかった(理研GSCが決定したマウスhypothetical proteinの構造が世界初である)。もう一つの成功例は、マウスのペルオキシソーム因子PEX1のN末端ドメインの結晶構造であり(文献4)(図1b, 1WLF)、タンパク質中のドメインの存在の予測は、産総研CBRCの富井健太郎博士が作成したプログラムFORTEに拠った。富井博士には、他にも他の2例のドメイン境界決定を手伝ってもらった経緯がある(論文投稿中)。

### 5 おわりに・・・バイオフィーマティクス主導構造生物学の可能性

前述のように、高速クローニング技術を手にいれたことで、かねてよりの夢であった情報生物学者と構造生物学者のより緊密な共同研究が実現可能となった。このとき、実証実験にかかるコストが安価であるということは、共同研究を円滑に行ううえで意外に重要なファクターなのではないかと思う。その意味において、バイオフィーマティクス「主導」の構造生物学は、技術的には可能である。しかし、一方で、「未解析」「機能未知」「新規」のドメインの立体構造解析のような研究に対して、構造生物学や分子生物学の分野における評価は残念ながら高くない。すでに生物学的、医学的に多数の研究員の興味を集めている「花形分子」の構造解析が、成功すればインパクトも大きいのは対照的である。一方「ドメインハンティング」の成果は地味であり、前述のような共同研究を発展させる為の壁となっているように感じる。しかし筆者は、分子機能未知・既知に関わらず、これまで立体構造が得られていない新規のドメインの基本フォールドや表面構造が明らかになることの意義は大きいと信じている。

### 参考文献

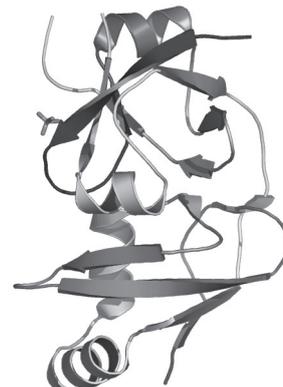
1. Tenno, T., Goda, N., Tateishi, Y., Tochio, H., Mishima, M., Hayashi, H., Shirakawa, M. and Hiroaki, H\*. , A vector suited to high-throughput expression of isotopically-labeled peptides. *Protein Eng Design Sel.* 17 305-314 (2004).
2. Goda, N., Tenno, T., Takasu, H., Hiroaki, H\*. , and Shirakawa, M. The PRESAT-vector: Asymmetric T-vector for high-throughput screening of soluble protein domains. *Protein Sci.* 13 652-658. (2004).
3. Takasu, H., Jee, J. G., Ohno, A., Goda, N., Fujiwara, K., Tochio, H., Shirakawa, M., and Hiroaki, H\*. Structural characterization of the MIT domain from human Vps4b. *Biochem Biophys Res Commun.* 334 460-465. (2005).
4. Shiozawa, K., Maita, N., Tomii, K., Seto, A., Goda, N., Tochio, H., Akiyama, Y., Shimizu, T., Shirakawa, M., and Hiroaki, H\*. Structure of the N-terminal domain of PEX1 AAA-ATPase: characterization of a putative adaptor-binding domain. *J Biol Chem.* 279 50060-50068. (2004)

図1a



ヒトエンドソーム膜制御因子Vps4bのMITドメインの溶液構造(PDB: 1WR0)

図1b



マウスペルオキシソーム因子PEX1のN末端ドメインの結晶構造(PDB: 1WLF)

## リレー紹介:日本のバイオインフォマティクス研究室

### ■ 東京大学大学院新領域創成科学研究科・森下研究室

佐々木 伸(東京大学大学院新領域創成科学研究科情報生命科学専攻)

森下研究室は東京大学大学院新領域創成科学研究科情報生命科学専攻に所属しており、千葉県柏市にある東京大学柏キャンパスを主な研究の所在地としております。

生物・生命の現象を情報科学的方法によって理解していこうというのがバイオインフォマティクスという学問分野ですが、その中で生物や生化学的な実験を行うウェットな領域と、主として計算機による解析や技術開発を行うドライな領域という2つに大きく分けられています。我々の研究室はドライ分野の研究でPCレベルの計算機から大規模計算機を用いるものまで、研究対象としては大規模網羅的なデータの解析・理論の研究を行っており、ウェット分野の研究室との共同研究を実施して研究を行っています。

現在取り組んでいる研究テーマの一部としては、この分野の最も基盤的な情報の一つであるゲノム塩基配列をホールゲノムショットガン法によって得られた小さなゲノム断片データからゲノム全体を再構築するゲノムアセンブラソフトウェアの開発があり、大規模なゲノムサイズを持つ脊椎動物のメダカゲノムのアセンブリや、生物学的および工業的な点からも注目されているカイコ(蚕)ゲノムのアセンブリを行っています。

またメダカゲノム研究においては、ゲノム配列のアセンブリだけでなく、転写の開始点を示す5' SAGEタグに基づいた遺伝子予測・アノテーションや、他の生物のゲノムとの塩基配列や遺伝子比較から魚類祖先ゲノムの推定や脊椎動物祖先ゲノムの推定、あるいはゲノム中の反復配列の抽出や魚類で起きたゲノム重複についての解析、SNP比較解析などのゲノム解析全般を行っています。これらのゲノム配列およびアノテーション、解析データは当研究室が作成・運営しているUTゲノムブラウザ(<http://medaka.utgenome.org>)上において公開されています。

この他にも、バイオインフォマティクスツールの理論・実装両面での研究開発も主なテーマであり、塩基配列アラインメントツールや、ターゲット指向性が高くオフターゲット(想定対象以外のター

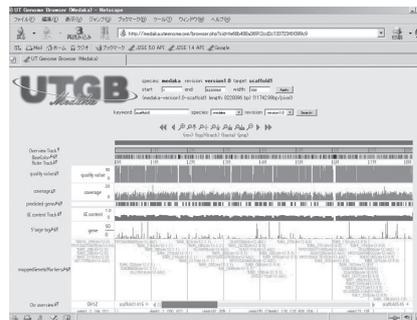
ゲット)との反応が少ないPCRプライマーやマルチプレックスプライマーの設計(<http://ps.cb.k.u-tokyo.ac.jp/>)、同様にオフターゲットへの影響が少ないsiRNA(<http://design.rnai.jp/>)、dsRNA(<http://dscheck.rnai.jp/>)の設計なども行っています。

このようにゲノム情報の最上流であるゲノム配列の再構築や解析も行っていますが、一方で、最終的な結果であり最下流とも言える表現型に対する解析についても当研究室で行っています。定量的な計測、解析が難しい表現型解析研究ですが、二次元画像情報(写真画像)に対して計算機による自動的な処理によって種々のパラメータを精度良く取得し、定量的で大規模網羅的な表現型解析を可能としています。これらの具体例としては、出芽酵母の非必須遺伝子破壊株の形態解析や、遺伝子強制発現ショウジョウバエの翅の画像解析によって、遺伝子パスウェイや機能についての知識の発見を行っています。

このように、ウェットの実験をしている研究者・チームと協力し、ギガスケールのバイオデータに対して、数百CPU・数百ギガバイトメモリ以上の計算能力を理論的・实际的に、また効率的に駆使しながら、それらの中から新たな知見を見つけ出していくというスタイルが当研究室のアプローチ方法であり、特定の研究対象に止まらず、今後のバイオインフォマティクス分野全体に対する貢献が可能なのではないかと考えています。



柏キャンパス総合研究棟



## 研究会の活動報告

### ■ システムバイオロジー研究会

主査 倉田 博之(九州工業大学情報工学部)

システムバイオロジー研究会は、2003年度から主査、松野浩嗣(山口大学)、副査、倉田博之(九州工業大学)で始まり、2006年度から第2期が、主査、倉田博之、副査、畠山真里子(理化学研究所)

の新しい陣容で始まった。運営委員として、皿井伸明(京都大学)、杉本昌弘(三菱スペースソフトウェア、慶応大学鶴岡キャンパス)、川路英哉(NTTソフトウェア)、松野浩嗣が協力している。バイオイン

フォーマティシャン、システム工学者、実験とコンピュータの両方を駆使するシステム生物学者・医学者で構成されている。また、大学、研究機関、企業のバランスを考え、地域的にも分散しているメンバーである。時代の先端情報を幅広く収集し、分析することによって、システムバイオロジーの発展に寄与することを目指す。第2期の最初の研究会は、第11回システムバイオロジー研究会として、6月30日、理化学研究所横浜研究所で開催された。研究会の概要を簡単に報告する。

第11回のテーマは「様々な生物におけるゲノムネットワーク」(崑山真里子主催)で、3題の招待講演と4題の一般講演を行なった。参加者は合計39名(会員23名、非会員16名)。招待講演は、酵母2ハイブリッド法を用いたヒト転写因子のタンパク質相互作用ネットワーク(日立製作所・ライフサイエンス推進事業部 武田志津氏)、ヒトに存在するマイクロRNAの同定(理化学研究所 ゲノム科学総合研究センター 古野正朗氏)、および細菌におけるリジン代謝転写ネットワーク(東京大学生物生産工学研究センター 西山真氏)で、ハイスループット解析からのデータの解釈や生物的機能予測および、詳細な実験データに基づく転写因子機能予測など、実際のゲノムネットワークを解析するための戦略や方法論について討論した。続いて行われた一般講演では、ゲノムネットワークを解析するアルゴリズムやシミュレーションを用いたシステム解析についての活発な議論を行った。研究会終了後、懇親会を開き親睦を深めた。

第2期の活動は、第1期と同様に研究会の開催が中心となる。毎年、首都圏で2回、地方で2回開催する予定である。首都圏では、システムバイオロジーのタイムリーなトピックを提供できる研究者を招

待して、多数(数十から百)の研究者や技術者に参集いただいて活発な議論を行う。地方で開催するときは、地域の研究者を中心に講演していただき、少人数の仲間が集まって親睦を深めていく。研究会は2-3名の招待講演者と4-5名の一般公募による演者から構成される。一般公募では、発表者を公募し、研究者や技術者の方が直接参加することによって、研究会のアクティビティーを高める。第1期では、東京、横浜、京都、大阪、下関、博多、那覇など主として東京から西側の都市で開催されたが、第2期では、北側へ展開していくことも考えている。研究会を開くことによって、その地域において、システムバイオロジーやバイオインフォマティクスに興味をもつ研究者や技術者が増えることを期待する。

3年間で11回の研究会が開催されていることからわかるように、本研究会はバイオ関連の皆様の大きな支持をいただいておりますので、今後さらに開催回数を増やしていけるよう努めます。今後ともご支援よろしくお願い申し上げます。



第11回システムバイオロジー研究会発表の様子 2006年6月30日、理化学研究所横浜研究所

## ■ 創薬インフォマティクス研究会

主査 白井 宏樹(アステラス製薬株式会社、東京医科歯科大学)

副査の青島健先生(エーザイ)のご企画により、バイオデータベースを話題とした第6回研究会を9月に東京大学医化学研究所にて開催致しますので、多方面からのご参加をお願い申し上げます。案内の詳細は学会WebSiteから見られます。また、本研

究会は、創薬インフォマティクスの分野において、創薬現場のニーズと、そのソリューション提供側との間の情報共有の促進を目的の一つにしております。このため、会員の皆様の幅広いご意見やご要望をお聞かせ願えたら、と考えております。

## ■ 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研究センター)

オントロジー研究会では本年度2回(第3回と第4回)の研究会を予定しています。第3回は「データベースとオープンバイオ」というテーマで10月後半に開催することを計画中です。現在、日本では大小様々なバイオ関係およびケモバイオ関係のデータベースが構築されていますが、データベース開発者同士の連携はそれほど活発ではありません。特に研究室レベルで構築している中小規模なデータベース同士を連携して利用できるようにすることは日本のデータベースコミュニティを活性化させる上でも重要ですが、そのためには

データベース開発者同士がデータの相互参照やオントロジーについて情報交換することが必要です。今回はそのような情報交換をデータベース開発者とデータベースアクセスのインタフェース構築に関わっているオープンバイオ研究者に参加して頂き、議論してもらおうと考えています。場所は東京大学医科学研究所を予定しています。オントロジーだけでなくデータベース紹介の場としてもご利用頂けますので、一般の発表も応募したいと考えています。興味のある方は五斗(goto@kuicr.kyoto-u.ac.jp)までご連絡下さい。

## ■ 機能ゲノミクス研究会

「機能ゲノミクス研究会」が発足しました。詳細は以下のサイトをご覧ください。

[http://www.jsbi.org/jsbi\\_new/kenkyukai/genomics.html](http://www.jsbi.org/jsbi_new/kenkyukai/genomics.html)

## 地域部会の活動報告・活動計画

### ■ 北海道部会

遠藤 俊徳 (北海道部会長、北海道大学大学院情報科学研究科)

この春、北海道地域部会が発足した。首都圏や関西圏にばかり目を向けるのではなく、もっと地域に根ざした研究活動と交流の積極的推進が目的と考えている。これまでも北大を中心にバイオインフォマティクスセミナーや春の学校といった活動を行っており、関心の度合いが決して小さいものないことを実感してきている。また北海道経済産業局の支援を受け、産業界を中心とした北海道バイオインフォマティクス研究会の活動も行われていると聞いている。今後は産学間での有機的連携をも構築して行けるような体制作りにも臨みたいと考えている。

バイオインフォマティクスという言葉が与えるイメージは非常に多様なようで、過剰な期待をする人、逆に全く役に立たないという人などがある。既に多くの技術が確立している分子生物学などの分野からみれば、誰にでも使える確かな技術が少な過ぎるのかも知れないが、相同性検索をはじめとし、発現データやネットワーク、立体構造などの解析、フラグメントアセンブリ、質量分析、統計解析などなど、全くバイオインフォマティクスを使わない人はいないのではないだろうか。いろいろな人と話してみると、メ上手に使いこなすことさえできれば、すばらしい可能性を秘めているもという漠然としたイ

メージをもつ人が多いという印象がある。バイオインフォマティクス技術者に要求されるのは、これらのツールを正しく理解し、使いこなす能力である。実際、多くの人が使う相同性検索でさえ、結果をどのように理解したらよいか、表示されるスコアがどういう意味をもつか、よく分からないという声をきく。

こういった観点から、10月29日のバイオインフォマティクス技術者認定試験(BICERT)を札幌でも実施する。これまでは首都圏と関西圏のみで行われていたため二の足を踏んでいたひと、地元であれば受験しやすくなるだろう。

研究交流としては、BICERTに前後して地域部会としてのセミナー開催を考えている。大学でバイオインフォマティクス関連の研究を行っている先生方に、ゲノム、構造、発現、人獣共通感染症、疾患、創薬、進化、情報科学、ハードウェア設計など様々な題材について、また北海道バイオインフォマティクス研究会など、企業の方々にも産業の観点からお話しを願うつもりである。

始まったばかりの北海道地域部会だが、地域の特色を生かした活動を通じて新しいつながりや有機的な連携、研究や製品開発の着想が生まれてくることを期待したい。

### ■ 東北部会

中山 雅晴 (東北部会長、東北大学大学院医学系研究科循環器病態学分野)

昨秋「明日使えるバイオインフォマティクス講座」というセミナー開催を機に、バイオインフォマティクス学会東北支部として発足いたしました。会員の皆様におかれましてはなかなか馴染みのない土地かもしれませんが、実はバイオインフォマティクスに対し興味や関心を持つ研究者・学生は多く、今後東北にも足を運んでいただいて情報交換をお願いできれば幸甚に存じます。

本年は4月に中井謙太会長にオーガナイザーをお願いして「トランスクリプトーム」をテーマにしたセミナーを開催いたしました。前回同様、来場者は80人を越え、熱い質疑応答が繰り広げられました。中井先生にはトランスクリプトーム全般にわたっての方法論や、実際のツールやデータがあるサイトの紹介を中心に、わかりやすく講義していただきました。鈴木穰先生、伊藤隆司先生には、実際のトランスクリプトーム解析を、従来の方法のみならずオリジナルな考えをもとにした方法論と、それにより得られた豊富なデータで示していただき、非常にエキサイティングな内容でした。セミナー後回収したアンケートではいずれの講義に対しても参加者から高い満足度が示されました。

セミナーの内容は以下のとおり

バイオインフォマティクスセミナー in 東北 2006春

日時：平成18年4月15日 土曜日 午後1時から

場所：民衆会館記念ホール 仙台市青葉区広瀬町3-34

メインテーマ：「トランスクリプトーム」

講演1 「トランスクリプトームの情報解析入門」

東京大学 医科学研究所 中井 謙太 先生

講演2 「トランスクリプトーム解析の最前線～

実験手法とデータ解析」

東京大学新領域創成科学研究科 鈴木 穰 先生

講演3 「酵母のトランスクリプトームを探る」

東京大学新領域創成科学研究科 伊藤 隆司 先生

その他アレイ解析のセミナーなどの勉強会やメーリングリストの設置など、少しずつではありますが活動の幅を広げています。今後もセミナーの定期開催、東北部会のウェブページの立ち上げなどを行って支部会としての活動の充実をはかり、バイオインフォマティクス学会員や協賛企業を増やしていきたいと思っております。今後ともバイオインフォマティクス学会皆様のご協力をお願いいたします。



## ■ 関西西部会

坂田 恒昭(関西西部会長、大阪大学サイバーメディアセンター)

関西地域は政府の都市再生本部によりバイオテクノロジー、特に創薬(大阪)および再生医療(神戸)の中心として位置づけられています。関西地域部会では、創薬・診断薬・機能性食品・医療用機器という産業界への出口を見据えた教育・啓発・産官学マッチング・異分野融合を目指して活動しています。即ち、地域部会活動(教育・啓発・マッチング)を通して革新的新薬、診断薬、機能性食品、医療用機器の創製(研究・開発両面)に役立つバイオインフォマティクスの利用と革新的創造を期待しています。

関西地域部会を運営するにあたり、以下の産官学の先生方に運営委員をお願いしています(氏名五十音順・敬称略)。坂田 恒昭(大阪大学サイバーメディアセンター 客員教授、運営委員長)。浅野 薫(シスメックス(株)中央研究所 所長)、奥野 恭史(京都大学大学院薬学研究科ゲノム創薬科学分野 助手)、梶本 修身((株)総合医科学研究所 取締役)、黒川 顕(奈良先端科学技術大学院大学バイオサイエンス研究科 助教授)、佐古田 三郎(大阪大学大学院医学系研究科生体統合医学神経機能医学講座 教授)、白井 剛(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)、中川 博之(大日本住友製薬(株)ゲノム科学研究所 主任研究員)、中島 弘(大阪府立成人病センター 臨床検査科部長)、高木 勉(田辺製薬(株)研究本部研究企画部 主席部員)、田中 玲爾(塩野義製薬(株)創薬研究所 主管研究員)、山崎 勝彦((独)医薬基盤研究所 研究振興部長)。また、顧問として中村 春木(大阪大学蛋白質研究所 附属プロテオミクス総合研究センター 教授)、松田 秀雄(大阪大学大学院情報科学研究科バイオ情報工学専攻 教授)のお二人の先生に、事務局は三井情報開発(株)大阪支店バイオセンターの福岡 良忠センター長と奥村 利幸の両氏にお願いしています。

地域部会の研究会は「バイオメディカル研究会」と名づけて半年に一回の開催を予定しています。開催場所は大阪大学中之島センターを中心として開催しています。ケミカルゲノミクス、システムバイオロジー、インシリコ創薬、医療情報(PMS、SNPs情報など)を主テーマとして、先ほど述べましたように、医薬品・診断薬・診断機器・機能性食品などへの出口、異分野融合、産業界へのマッチングを重視しています。

2006年2月24日開催の第1回研究会では、上記主要4分野の

総論講演を行い、多数の製薬企業・食品企業の担当者のお席を得ると共に、この分野での若手研究者へ期待する声が寄せられました。

第2回研究会では、2006年9月12日(火)に大阪大学中之島センターにて産業界の期待に答えるべく、システムバイオロジー分野、及びケミカルバイオロジー分野に焦点をあてて開催を予定しています。また、これらの分野における若手研究者による発表(各々3題:発表15分を予定)を計画しています。若手の研究者の方々にとっては自らのシーズを産業界の方々に聞いていただき産業化への橋渡しをするのと同時に、産業界への人材の橋渡しも行えるものと期待しています。

連絡先: 日本バイオインフォマティクス学会 関西地域部会  
〒560-0082 大阪府豊中市新千里東町1-4-2  
バイオグリッドセンター関西内  
TEL 06-6873-2116 FAX 06-6873-2117  
E-mail jsbi-kansai@biogrid.jp

### ◆第2回バイオメディカル研究会の概要

日時:平成18年9月12日(火)午後1時~午後5時15分  
場所:大阪大学中之島センター10F佐治敬三メモリアルホール  
プログラム:13:00-13:10 挨拶

坂田恒昭(大阪大学サイバーメディアセンター客員教授)  
<システムバイオロジー関連講演>

13:10-14:20 基調講演

上田泰己(理化学研究所発生・再生科学総合研究センター)

14:20-15:20 システムバイオロジー一般演題 15分x4題

(座長:中島弘 大阪府立成人病センター 臨床検査科部長)

<ケミカルバイオロジー関連講演(ケモインフォ、バイオインフォ関連)>

15:35-16:45 基調講演

奥野恭史(京都大学大学院薬学研究科)

16:45-17:15 ケミカルバイオロジー一般演題 15分x2題

(座長:奥野恭史)

参加人数:約150名

懇親会:(あり,事前登録要,懇親会費5千円)

## ■ 中国四国部会

妹尾 昌治(中国・四国部会長、岡山大学大学院自然科学研究)

本年度より発足した中国・四国地域部会では、新たな研究会を設立する。現在、バイオマーカーをテーマとして、会員、非会員を問わず参加者を募集し、第1回「次世代バイオマーカー研究会」開催に向けて準備を進めている。

バイオマーカーは診断や創薬開発あるいは環境評価において重要な情報源となるためその種類が多ければ多いほど利用価値が高い。また、バイオマーカーの研究を発展させて実用的価値を充実させるためにはマーカーを探索あるいは解析する新たな技術を

創出してさらに多くのマーカーを利用可能にする事に関心が高まっている。ヒトゲノムプロジェクトが終了した今日ではバイオマーカーに対する考え方も大きく変化し、RNA、DNA、タンパク質、またはタンパク質断片をベースとした分子情報が新たにバイオマーカーに加わった。バイオマーカーの概念自身は20年以上前から存在していたが、現在でも、確立されたバイオマーカーはまだ少ない。既存の概念を越える次世代バイオマーカーの探索や研究が可能になったことで、新しいバイオマーカーの開発が成功すれば、特許に

よる権利化も可能で、収益向上も期待できるので、この研究開発に取り組む製薬企業やバイオベンチャーも多い。「ポストゲノム・バイオマーカー」とでも言うべき分子バイオマーカーが、臨床診断や新薬の発見や開発に欠かせない情報として脚光を浴びつつある。

バイオマーカーとは、具体的には人間をはじめとするあらゆる生物の生体情報を数値化・定量化した指標であり、学術的価値は言うまでもなく、診断、医療、創薬開発あるいは環境評価などへの実用価値も高い。つまり、疾病などに起因あるいは関連して発現する化学物質の量や濃度、あるいは局在を数値化して疾病の状態や変化、治癒の程度を特徴づける指標とすることができれば、これが医療や創薬の分野で有用なバイオマーカーとなる。代表的なバイオマーカーである血糖値やコレステロール値などは、生活習慣病の指標としてすでによく知られているが、がんやアルツハイマーのような難治性疾患のバイオマーカーの需要も高く、診断薬開発が注目されている。

罹患後の治療効果の測定にもバイオマーカーは重要だが、その一方で、予防のための日常的な指標としても有用である。疾病が予防されれば患者の医療費負担が軽減する結果、国の医療保険の負担軽減(医療費削減)につながる。同時に、患者のQOLが向上するだけでなく介護による家人の負担を軽減することにより、健全な個人消費を生んで経済発展の一助となり国民生活が豊かになる事も想像に難くない。

疾病予防の手軽な手段として期待されているものに機能性食品がある。疾病予防のバイオマーカーの研究が進んで、機能性食

品の有効性をバイオマーカーによって科学的に証明し、機能評価法が確立できれば、さらなる機能性食品の開発が可能となる。

環境に目を向けると、主として生殖機能へ現れる可能性がある外因性化学物質による内分泌かく乱は、ヒトを含めた多くの生物の種の存続に関わる問題として懸念される。しかし、内分泌系を介した生体機能に対する悪影響の可能性は、その実験的な検出・評価において認められる変化と現実の現象・病態との相関関係には相当な不確かさが存在する。したがって、内分泌かく乱物質問題に関わる多くの現象と化学物質との因果関係の有無の検証や、内分泌かく乱作用に関わる評価法の確立につながる知識の収集と基礎概念の確立が必要とされており、ここでも新たなバイオマーカーの発見が期待されている。

2003年の市場調査によれば、分子バイオマーカー、診断、分子バイオマーカーに関する臨床研究室や臨床検査市場の世界全体の規模は約7000億円とされ、今後も20%以上の伸び率で成長すると予想されている。診断市場と製薬業界は、確かにそれぞれ数多くのチャレンジに直面しているが、新しいビジネスへのアプローチを見いだすことができれば、分子診断市場を安定成長へ導くはずである。

このような様々な社会的背景の下で、本研究会を設立する事には大きな意義があり、新しいバイオマーカーの概念の提唱からバイオマーカーの評価解析方法まで、幅広い角度からテーマを取りあげてバイオマーカー研究に関心を持つ研究者の交流の場を構築したい。

## 九州・沖縄部会

藤 博幸(九州・沖縄部会長、九州大学生体防御医学研究所)

九州の地を中心としたバイオインフォマティクス研究者の交流と若手研究者の育成を目指し、昨年度から日本バイオインフォマティクス学会九州支部会を設立し、活動を開始しています。活動は、講演会を中心に行っており、昨年は10月に「プロテイン・インフォマティクス」というテーマで第一回目の講演会を行いました。また、本年度は6月に、「医療インフォマティクス」というテーマでの講演会を開催しました(昨年の講演会についてはニュースレターで報告してありますので、詳細はそちらをご覧ください。また、今年度の講演会の詳細については、この記事とは別に開催報告がニュースレターに掲載されますので、そちらをご覧ください。)。これらの講演会の開催にあたっては、九州大学大学院システム生命科学府の後

援をいただきました。今後も講演会を企画していく予定ですが、日本バイオインフォマティクス学会の様々な研究会との連携企画なども考えていきたいと思っています。また、講演会だけではなく、テーマを絞った講習会なども企画していきたいと思っています。現在、藤 博幸(九州大学生体防御医学研究所、支部長)、久原 哲(九州大学農学研究院)、岡本 正宏(九州大学農学研究院)、北島 正人(富士通九州システムエンジニアリング)(敬称略)をコメンターとして企画立案を行っていますが、近隣の方で、運営(講演会や講習会の企画、講師依頼など)にご協力いただける方がいらっしゃいましたら、御連絡ください。

## 国際会議レポート

### ncRNAワークショップ

佐藤 健吾(JBIC特別研究員, CBRC)

7月16日から28日の日程でバルセロナ近郊の避暑地 Benasque で開催されたComputational approaches to functional and regulatory RNAs というワークショップに参加してきました。このワー

クショップについて御存じの方はあまり多くないと思います。なぜなら、トピックが RNA Bioinformatics に限定されていることに加え、このトピックで業績がある研究者を主催者が招く形のclosedなワーク

ショップであり、ほとんど宣伝していないからです。総勢55名の参加者の中には、思わずサインをもらいたくなるほど著名な研究者や、素晴らしい論文を連発している若手研究者もおり、大変豪華なメンバーでした。

日本からは、慶應義塾大学生命情報学科の榊原教授、奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科関研究室の加藤さんと私の3人が参加しました。

このような形式のワークショップに参加したのは初めてだったため、驚きの連続でした。まず驚いたのは、ワークショップのスケジュールが当初まったく決まっていなかったことです。初日の顔合せの後、次の日からのセッションのテーマを決めていきました。RNA secondary structure prediction, structural alignmentなどの定番のテーマ、RNA gene finding, miRNA target prediction などの現在もとても盛んなテーマ、3D structure prediction, RNA ontology などの将来を見据えたテーマが選ばれました。セッションのテーマの一覧を見るだけでも RNA Bioinformatics の現状をある程度把握することができます。

通常国際会議であれば、時間を無駄にしないためにスケジュールはきっちり詰めて行われるのが一般的だと思います。しかしこのワークショップは、スペインというお国柄のせい、朝は遅く、昼休みが長く、一日につき2セッションのみのゆったりしたスケジュールでした。その代わり、サボる人はほとんどおらず、一つ一



つの中身は非常に濃かったと思います。

次に驚いたのが発表形式です。プロジェクトも用意されていたのですが、半分ほどの発表者が黒板とチョークを使って発表していました。発表中にも質問が飛び交い、議論が始まります。普通の国際会議とはまったく異なり、どちらかというと大学の研究室のセミナーに近い雰囲気でした。海外留学の経験がない私にとっては、束の間の海外研究留学気分を味わうことができ、大変良い経験になりました。

このような形の会議は、様々な分野の研究者が一同に会する国際会議では難しいと思います。しかし、例えば国内の研究会などであれば、黒板とチョークを使ったセミナー形式の発表も議論を深めることができ面白いかもしれません。

RNA Bioinformatics の世界で最先端を走っている研究者と交流を深められ、私にとって大変有意義なワークショップでした。

参考URL: <http://benasque.ecm.ub.es/2006rna/2006rna.htm>

<http://benasque.ecm.ub.es/2006rna/cgi-bin/talks/allprint.pl>



## JSBi学会創立 5 周年記念出版

# バイオインフォマティクス事典

日本バイオインフォマティクス学会 編集

編集委員：宮野 悟 (委員長)・江口至洋 (副委員長)・金久 實・高木利久・中井謙太  
A5判・834頁・上製・2段組・510項目 定価14,700円(税込) (ISBN4-320-05628-0)

**本学会の会員は12,000円(税・送料込)で購入することができます!**

次の内容をFAX(販売課03-3947-2539)またはE-mail(藤本:fujimoto@kyoritsu-pub.co.jp)で共立出版へお送りください。詳細は本学会のHP(<http://www.jsbi.org/>)

### ご注文様式

1. JSBi学会会員割引(単価12,000円)で注文します。
2. 書名: バイオインフォマティクス事典
3. 冊数: 冊
4. お名前:
5. お届け先:
6. 同電話番号:
7. 公費・私費の別:
8. JSBi学会の会員です: はい

好評  
発売中!



80th  
Anniversary

共立出版

〒112-8700 東京都文京区小日向4-6-19 <http://www.kyoritsu-pub.co.jp/>  
TEL 03-3947-2513 (販売課直通) / FAX 03-3947-2539 (販売課)

◆内容見本送呈◆

## 学会からのお知らせ

### ■ バイオインフォマティクス技術者認定制度

「バイオインフォマティクス技術者認定制度平成18年度BICERT2級検定試験」が実施されます。

日 時：平成18年10月29日(日) 場 所：全国8都市(札幌、仙台、東京、名古屋、大阪、金沢、岡山、福岡)  
 申込締切：平成18年9月末日 詳 細：<http://www.jbic.or.jp/bicert/index.html>

### ■ 年会・総会、GIW2006開催のお知らせ

日 時：平成18年12月18日(月)～20日(水) 場 所：パシフィコ横浜会議センター3階  
 論文投稿締切り：平成18年9月1日(予定) ポスター/ソフトデモ投稿締切り：平成18年10月10日(予定)  
 問合せ：GIW2006事務局 [giw2006@ims.u-tokyo.ac.jp](mailto:giw2006@ims.u-tokyo.ac.jp) <http://giw.ims.u-tokyo.ac.jp/giw2006/>

### ■ 研究会、地域部会の開催のお知らせ

#### ・第12回システムバイオロジー研究会

日 時：2006年8月30日  
 場 所：鶴岡市先端研究所産業支援センター  
 詳 細：[http://www.jsbi.org/jsbi\\_new/kenkyukai/sysbio/12th\\_sysbio\\_news.html](http://www.jsbi.org/jsbi_new/kenkyukai/sysbio/12th_sysbio_news.html)

#### ・第12回システムバイオロジー研究会サテライトミーティングin 秋田

日 時：2006年8月31日  
 場 所：スカイライトバイオテック本社会議室  
 詳 細：[http://www.jsbi.org/jsbi\\_new/kenkyukai/sysbio/12th\\_sysbio\\_satellite\\_news.html](http://www.jsbi.org/jsbi_new/kenkyukai/sysbio/12th_sysbio_satellite_news.html)

#### ・第2回バイオメディカル研究会(関西部会)

日 時：2006年9月12日(火)  
 場 所：大阪大学中之島センター10F佐治敬三メモリアルホール  
 詳 細：[http://www.jsbi.org/jsbi\\_new/bukai/kansai/kansai\\_2nd\\_news.html](http://www.jsbi.org/jsbi_new/bukai/kansai/kansai_2nd_news.html)

#### ・第6回創薬インフォマティクス研究会

日 時：2006年9月26日(火)  
 場 所：東京大学医科学研究所一館講堂  
 詳 細：[http://www.jsbi.org/jsbi\\_new/kenkyukai/souyaku/6th\\_news.html](http://www.jsbi.org/jsbi_new/kenkyukai/souyaku/6th_news.html)

### ■ 平成17年度収支決算報告

・日本バイオインフォマティクス学会平成17年度収支決算報告(平成17年4月1日～平成18年3月31日)

収入の部		支出の部	
前期前受金	2,988,000	研究会	1,161,153
平成17年度会費	881,000	ニュースレター作成	956,550
平成17年度賛助会費	1,650,000	夏の学校	860,869
平成17年度入会金	122,000	G.I Vol. 16作成	702,000
研究会参加費	635,000	地域部会	690,715
広告掲載料	20,000	会議費	391,251
OUP賞賞金	30,000	郵便・宅配便	384,995
受取利息	38	旅費・交通費	321,090
前期繰越	5,989,742	GIW'05 旅費補助	300,000
		G.I. Vol.15 HTML化	293,000
		備品	194,880
		消耗品	127,142
		セキュアサーバID発行費	85,050
		電話料金	83,751
		クレジット・郵便手数料	56,940
		所得税(源泉徴収)	37,000
		OUP賞賞金	30,000
		振込手数料	22,198
		webサービス	11,550
		次期繰越	5,605,646
当期収入合計	12,315,780	当期支出合計	12,315,780
前受金		平成17年度財産報告(平成18年3月31日現在)	
平成18年度入会金	13,000	みずほ銀行白金出張所 普通口座	1,401,847
平成18年度会費	868,000	三菱東京UFJ銀行目黒駅前支店 普通口座	1,858,091
平成18年度賛助会費	1,650,000	郵便口座 #00990-8-153207	4,766,285
平成17年度決算次期繰越	5,605,646	現金	110,423
合 計	8,136,646	合 計	8,136,646

上記の通り報告致します。  
 平成18年3月31日

監査の結果、上記の通り相違ありません。  
 平成18年5月12日  
 平成18年5月18日

会 計 鈴木麻子 ㊞

会計監査 中村春木 ㊞  
 会計監査 永井啓一 ㊞

## 学会議事録等

### ■ 第15回評議員会議事録

日 時：2006年3月24日14時～15時 場 所：八重洲富士屋ホテル・紅葉  
出席者（敬称略）：江口、中井、松野、蓑島、輪湖（幹事・評議員）、小長谷、五斗、小森、田中、藤、西川、北島、五條堀、清水（謙）、辻本、長野、平川、福本、鈴木、渋谷（議事録）

#### 1. 新評議員の紹介

平成18年度より評議員となった北島委員、五條堀委員、清水委員、辻本委員、中井委員、長野委員、平川委員、福本委員に自己紹介をして頂いた。

#### 2. 部会について

学会の地域における活動を活性化するために昨年から地域部会を立ち上げたが、次年度より地域部会運営のための規定を策定することになり、それについて江口会長より報告があった。学会事務局は、各地域のバランスと長期にわたる活動を支援して行くことが確認された。また、作成された規定には前文を加えて、その趣旨をよりわかりやすくすることになった。また、各部会のアクティビティの方向性については、各部会に裁量権があることが確認された。さらに、平成18年度に設立された地域部会長の推薦およびその承認がなされた。承認された地域部会長は以下の通り。

北海道部会長	遠藤俊徳（北海道大学）
東北部会長	中山雅晴（東北大学）
関西部会長	坂田恒昭（大阪大学）
中国・四国部会長	妹尾昌治（岡山大学）
九州・沖縄部会長	藤 博幸（九州大学）

#### 3. 平成18年度研究会活動計画

平成18年度のバイオインフォマティクス学会の各研究会に関して江口会長から報告があり、来年度はシステムバイオロジー研究会、創薬インフォマティクス研究会、オントロジー研究会、及び新研究会として機能ゲノミクス研究会の4研究会で活動していくことになった。なお、生物情報ネットワーク研究会については、今後の活動方針を必要に応じて改めて審議することになった。

松野委員よりシステムバイオロジー研究会の予定に関して報告があり、首都圏、地方で各二回の研究会を実施する予定であることが報告された。この研究会に関しては、更に運営委員を増やす可能性があり、その際は評議委員会のメーリングリストで承認を行うこととなった。オントロジー研究会に関しても五斗委員より、18年度は年二回の活動をする予定であることが報告された。また、これら4研究会の新任運営委員について、機能ゲノミクス研究会を除いて承認され、機能ゲノミクス研究会については計画が固まったところで再度メール等で審議することになった。

#### 4. 学会倫理指針について

日本バイオインフォマティクス学会倫理綱領案について江口会長と蓑島委員より報告があった。これまでにその策定案に対し、

- ・もっとJSBiの特色が出せるとよいのではないかと
- ・倫理綱領は何に用いるのか？
- ・一部分表現にこなれていない部分がある。

・もう少しおおまかでもよいのではないかとといった意見が出されていることが報告された。また、この綱領に対して様々な意見が出され、これらの意見をいれてさらに案を練って行くことになった。

・多くの学会で倫理はそれほど異なるものではなく、JSBiの特色といっても底は同じなのではないかと、また、倫理規定は何か用に用いる、といったものではなく、心構え、ということではよいのではないかとまた作成された倫理綱領案は他学会と比較するとほぼ中間的な大きさである。（蓑島委員）

・個人情報について一言あってもよいのではないかと（田中委員・小長谷委員）

・情報システムが人の生命にかかわることもあり、このような倫理規定の策定は必要。（五條堀委員）

・科学研究には誠実さが必要であり、そういう意味でこういった倫理規定は重要。（長野委員）

・学会としてのポリシーが重要なのではないかと。（辻本委員）

・バイオインフォマティクスではネット上などで大量のデータを利用して研究を行うことが多い。そういったデータの扱いに関する倫理規定を盛り込めないかと（平川委員・清水委員）

#### 5. バイオインフォマティクス事典について

バイオインフォマティクス事典の出版予定について中井委員より報告があった。既に全ての原稿は集められ、現在は最終的な索引等の編集作業を行っている段階で、5月頃の発売を予定している。

#### 6. カリキュラムについて

学会の策定するバイオインフォマティクスのカリキュラムを改訂する計画について藤委員より報告があった。

#### 7. 平成17年度決算の中間報告

3月23日時点での日本バイオインフォマティクス学会の平成17年度会計について鈴木より報告があった。最終の収支報告は次回の評議委員会 でなされる予定。

#### 8. 平成18年度予算

江口会長より、平成18年度の予算案について報告があった。なお、謝金等に関しては、今後事務局でより正確に検討を行う。

#### 9. 平成18年度会長選挙

江口会長が会長を退くにあたり、18年度の会長選挙が行われた。

その結果有効投票数14に対し得票数13で中井委員が次期会長に選任された。

#### 10. その他

小長谷委員より、2006年度は国際会議INCOBが会場の都合の関係で、GIWと同一の日程となってしまったことが報告された。

以上

## ■ 第14回評議員会議事録

日 時：2006年3月24日14時～15時 場 所：八重洲富士屋ホテル  
出席者（敬称略）：江口、中井、松野、蓑島、白井、輪湖、渋谷（議事録）

- 1) 江口会長より、地域部会運営規定の策定についての報告があった。  
地域部会への参加は学会員無料、非学会員は有料とすることになっているが、予算の管理についてはしっかりと検討していかないとけない、との意見が出た。また、研究会についても地域部会と同様に有料無料のコンセンサスを主査の間でとるのがよいのではないかと意見が出た。  
また、これらを議論するため、研究会の主査間のメーリングリストを作成することになった。また、議論の結果、趣旨をわかりやすくするための前文を追加することになった。
  - 2) 江口会長より、地域部会長の推薦についての報告があった。
  - 3) 江口会長より、各研究会の活動報告について報告があった。  
生物情報ネットワーク研究会については研究会の存続に関して今後検討することになった。
  - 4) 江口会長および蓑島委員より学会の倫理綱領(案)について説明があった。  
何故必要か、使い方はどうするのか、文章をよりこなれたものにする、といったことを考慮しながら、今後評議員とのコンセンサスをとりつつ、文面を練っていくことになった。
  - 5) バイオインフォマティクス事典について中井副会長より報告があった。  
5月頃出版を予定している。分子生物学会までには出す予定。DVD版に関して、出版社の都合で予定はないが、出せたらよいのでは、という意見が出された。
  - 6) 江口会長より17年度会計および18年度予算に関して報告があった。  
GIW関連予算が増える予定だが、GIWの運営については今後慎重に議論検討をしていく予定であることが報告された。
- 以上

## ■ 第20回幹事会議事録

日 時：平成18年6月7日(水) 場 所：東京大学医科学研究所総合研究棟8階会議室  
出席者：(順不同、敬称略)中井(会長)、秋山(副会長)、江口、金久、五斗、白井、松野、遠藤(北海道部会長)、妹尾(中国四国部会長)、藤(九州部会長)、鈴木、渋谷(議事録)

1. 地域部会会長紹介  
今回から幹事に、地域部会会長の方々に出席をお願いすることになり、その紹介があった。
2. 予算状況について  
今後、学会の財政的な強さを確保するための、賛助会員の会費のあり方について議論がなされた。  
賛助会費を値上げするあるいは最低口数を2口としてお願いしていくのはどうか(江口)  
情報系企業においては、商品広告の機会が得られるために賛助会員利点があるが、製薬系企業では純粋に社会貢献活動として位置づけられており、かつ年々この手の支出は厳しくなっている。このため、増額に対して理解が得られない企業があるのではないかと、少々心配である。(白井)  
賛助会費を増やす前に会員のメリットをよりアピールする必要がある(妹尾)  
といった意見が出された。今後、賛助会員や評議員の先生方の意見を聞きつつ、検討していく。
3. BICERT(バイオインフォマティクス技術者認定制度)について  
秋山副会長から、バイオインフォマティクス学会も協賛しているBICERTについて報告があった。この認定制度は、JBICがこれまで東京、大阪で試験を行ってきたものである。これを、今後他の地方でも開催することによって、受験者の対象を広げ受験者を増やす努力をしていきたいと考えている。そのため、試験会場として教室、試験監督等を提供していただけるような研究室をJSBi会員の先生方に紹介していただけないかと考え、各地方の先生方に打診をして、検討中である。バイオインフォマティクス学会としても、各地域の先生方の紹介等を通じてこの活動を支援していくことになった。
4. 年会について  
今後GIWをAASBiで開催するのにあたり、来年以降JSBiの年会をGIWと別に開催することになった。それについてどのように開催するかについて、宮野幹事より案が出された。  
この開催のために作成した年会開催規定(案)が出され、それに関して議論が行われた。この案では、年会開催にあたって、プログラムを企画するプログラム委員会および、庶務、広報等を担当する組織委員会を組織する。  
また、ポスター集は作成するが、これをどういった扱いにするかについては今後検討していく。また、口頭発表については、ポスター発表の中からプログラム委員会が選定して発表をしてもらうことを考えている。また、概算による予算案も作成する。
5. 地域部会について  
地域部会活動に関して江口幹事より報告がなされた。  
昨年度は東北、九州、関西において、それぞれ地域部会活動を行われており、それぞれの部会長から活動の報告がなされた。  
北海道部会では、秋程度を目処にセミナー等を考えている(遠藤)  
中国・四国部会では、企業、大学、経済産業省から協力を得ながら、バイオマーカー研究会を企画している。(妹尾)  
九州部会では、先進的な研究会をいくつか既に企画した。こ

れからも年に二回程度の開催を考えている。また今後は講習会形式のものなどを検討する。(藤)

#### 6. 倫理規定について

江口幹事より倫理規定案を今後も検討していくことが報告された。

#### 7. カリキュラムについて

バイオインフォマティクス教育カリキュラムの最終案に関して金久幹事より報告があった。これに関して評議委員会で承認をお願いする予定であるが、それまでにWebで紹介しパブリックコメントを募ることとなった。

#### 8. 夏の学校について

夏の学校の準備状況について五斗幹事より報告があった。この夏の学校はコープイン京都において8月21日に行われる予定で、参加費については15,000円前後で調整中である。

#### 9. 学会ホームページについて

学会ホームページについて松野幹事より報告があった。バナー広告を今年度実行できるようにすることと、研究会の資料を学会員がとることができるようにすることが報告された。また、今後のホームページのアップデート等の管理の費用の発生を承認した。

#### 10. ニュースレターについて

8月末刊行予定で順調に進んでいることが中井会長より報告があった。

#### 11. 研究会について

白井幹事より、研究会の横の連携を強化するため、主査メンバーリストを立ち上げたことについて報告があった。

#### 12. AASBiについて

宮野幹事より、AASBiについての報告があった。GIWをAASBiのAnnual Meetingとして行うこととなっている。Steering Committeeとして金久實幹事、高木利久、宮野悟幹事及びLimsoon Wongがメンバーになっている。また、AASBiへのコンタクトパーソンをJSBiより出す必要があり、松野幹事を指名することになった。

#### 13. バイオインフォマティクス事典について

中井会長より、バイオインフォマティクス事典に関する報告がなされた。これに関して出版社との出版契約書について承認がなされた。実際の出版に関しては、各種雑誌に既に広告も出され、順調に発売に向け進んでいる。

以上

## ■ 第16回評議員会議事録

日 時：平成18年7月3日(月) 15:00～17:00

場 所：八重洲富士屋ホテル5階 つばき・あずさ 〒104-0028 東京都中央区八重洲2-9-1 TEL 03-3273-2111

出席者(敬称略・順不同)：中井(会長)、秋山(副会長) 有田、坂田、田中、辻本、長野、西川、平川、馬見塚(評議員)、宮野(幹事、評議員)、渋谷(幹事、議事録)、鈴木(事務局)

### 報告事項

#### 1. 会長挨拶と執行部紹介

中井会長より、執行部の紹介、学会会員数の変化等についての報告があった。

#### 2. JSBi事典の刊行について

中井会長より、JSBi事典の出版契約書についての報告があり、承認された。

#### 3. 昨年度及び今年度の予算について

中井会長より昨年度の収支決算について説明があり、承認された。また、鈴木より今年度予算案に関する報告がなされた。

#### 4. バイオインフォマティクス技術者認定制度について

(社)バイオ産業情報化コンソーシアムより本学会にバイオインフォマティクス技術者認定制度について協力要請があったことが、中井会長および秋山副会長より報告された。この協力にあたって、JSBi側に金銭的なリスク、負担等は生じないため、この協力をしていくことが承認された。

#### 5. 今年度の年会について

中井会長より、今年度の年会を国際会議GIWにあわせて行うことの報告があった。

#### 6. 地域部会の活動について

中井会長より、5つの地域部会の活動について説明があった。坂田関西地域部会長より、関西部会の研究会活動について報告がなされた。

#### 7. 夏の学校について

中井会長より、今年度の夏の学校の予定について説明があった。

#### 8. 学会ホームページについて

学会員、賛助会員のメリットとなるようなホームページの拡充を図っていくことが申し合わされた。具体的には賛助会員のバナー広告や、研究会講演資料等の会員への公開などをやっていく。

#### 9. ニュースレターについて

中井会長より、ニュースレターは年2回発行を行っているが、今年も予定通り進んでいることが報告された。

#### 10. 研究会の活動について

学会の研究会の活動について中井会長より報告があった。

#### 11. 後援活動等について

学会が後援する国際会議等について報告があった。

### 審議事項

#### 1. 来年度年会とGIW, AASBiとの関係について

宮野評議員より来年度の年会、GIWの扱いについて案が出された。

来年度より、国際会議GIWへの研究費等からの支出が難しくなったため、GIWはアジア・オセアニア地域の国際会議として、アジア・オセアニア地域の国々で持ち回りで会議を行っていく予定であることが報告された。なお、来年度に関してはシンガポ

ル開催が決定している。それにともない、年會をGIWとは別に  
 学会主体で行っていく必要があり、そのため作成された学  
 會年會開催規定(案)が報告され、それに関し活発に意見が  
 交わされ、基本的に承認されることになった。

案では年會で用いる言語については英語とするとしているが、  
 それについては再考の余地はないか?(有田)

講演の言語が統一されていないのはあまり好ましくなく、また  
 海外への情報発信としても重要なので、年會における研究発  
 表を英語で行うのはよいのではないか。なお、總會等は年會  
 とは異なるものであり、こちらは日本語で行う予定でいる。(宮  
 野)

日本語で行われている生物系の学会でも英語でやっては?と  
 という意見が出ることもある。英語を使うのはモチベーションを保つ  
 のによいのではないか?(中井)

といったような意見が出された。

また、年會の英文名称の略称を考えるとよいのではないか。

(秋山)

という意見が出され、略称を「JSBi (年号)」とすることとなっ  
 た。

また、宮野評議員より年會のプログラム委員会についての運  
 営案についても作成された案が報告された。この案では、ポス  
 ター発表を基本として、プログラム委員会がその中から口頭で  
 の講演を選定する方式を考えている。また、その開催期間、候  
 補地、予算案についても審議された。開催期間に関してはこ

れまでどおり12月第三週前後とするが、GIW等と時期が重な  
 ることはないようにする方向で進めて行くことになった。

2. 倫理規定について

現在制作している学会倫理綱領(案)について中井会長より  
 報告があり、今後もパブリックコメントを集めることとした。

3. 新カリキュラムについて

中井会長よりバイオインフォマティクス教育カリキュラムについ  
 て報告があり、今後ウェブで周知し、意見を集めることとなっ  
 た。

4. 賛助会費について

賛助会費等の扱いについて審議がなされた。

賛助会員のメリットを明確化する必要と、新たな会員の獲得の  
 努力の必要性はあるが、会費を2口以上を基本とした、細則の  
 改定を次回の總會で行う、という方向性で今後検討していく  
 ことになった。

以上



Secure Study<sup>®</sup> 多施設症例  
 イントリ-システム

<http://www.nttdata.co.jp/services/s090304.html>

臨床検査  
 医学研究向け  
 匿名化システム

SecureName<sup>®</sup>

<http://www.nttdata.co.jp/services/s090282.html>

株式会社NTTデータ ビジネスイノベーション本部  
 バイオサイエンス担当 E-mail: [bicbio@nttdata.co.jp](mailto:bicbio@nttdata.co.jp)  
 TEL: 03-3503-0360 FAX:03-3503-0370

株式会社NTTデータ 100-0014 千代田区永田町2-14-2 山王グランドビル 7F

## 学会の現況

・有効会員数(平成18年8月1日現在) 正会員:453名(学生会員60名を含む) 賛助会員:29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  
 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  
 日本新薬株式会社

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  
 日本アイ・ビー・エム株式会社  
 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

### 日本バイオインフォマティクス学会平成18年度役員一覧

会 長	中井 謙太 (東京大学医科学研究所)	副 会 長	秋山 泰 (産業技術総合研究所)
会計監査	中村 春木 (大阪大学タンパク質研究所)	永井 啓一 (株式会社日立製作所)	
幹 事	江口 至洋 (株式会社ジーエヌアイ)	渋谷 哲朗 (東京大学医科学研究所)	
	金久 實 (京都大学化学研究所)	白井 宏樹 (アステラス製薬株式会社)	
	五斗 進 (京都大学化学研究所)	松野 浩嗣 (山口大学理学部)	
	榊原 康文 (慶應義塾大学理工学部)	宮野 悟 (東京大学医科学研究所)	
地域部会長	遠藤 俊徳 (北海道大学大学院情報科学研究科)	藤 博幸 (九州大学生体防御研究所)	
	坂田 恒昭 (大阪大学サイバーメディアセンター)	中山 雅晴 (東北大学大学院医学系研究科)	
	妹尾 昌治 (岡山大学大学院自然科学研究科)		
評 議 員	秋山 泰 (産業技術総合研究所)	北島 正人 ((株)富士通九州システムエンジニアリング)	
	有田 正規 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)	五條堀 孝 (国立遺伝学研究所)	
	小長谷明彦 (理化学研究所)	坂田 恒昭 (大阪大学サイバーメディアセンター)	
	五斗 進 (京都大学化学研究所)	清水謙多郎 (東京大学農学生命科学研究科)	
	榊原 康文 (慶應義塾大学理工学部)	辻本 豪三 (京都大学大学院薬学研究科)	
	田中 博 (東京医科歯科大学)	中井 謙太 (東京大学医科学研究所)	
	藤 博幸 (九州大学生体防御医学研究所)	長野 希美 (産業技術総合研究所)	
	西川 哲夫 (株式会社リバーズプロテオミクス研究所)	平川 美夏 (京都大学化学研究所)	
	松野 浩嗣 (山口大学理学部)	福本 淳司 (日本SGI株式会社)	
	馬見塚 拓 (京都大学化学研究所)	宮野 悟 (東京大学医科学研究所)	

編

集

後

記

今号からニュースレターの担当幹事を引き継ぐことになりました榊原です。今回が最初の仕事ということで右も左もわからない状態で始めましたが、前任の松野先生がしっかりとお膳立てを下さっていてニュースレターの大きな枠組みができあがっていたこと、事務局の鈴木さんの多大なるサポートを頂きまして、ここに無事に会員のみなさまにお届けすることができました。今回は私にとって初回ということもあり、多少気合いも入って今までの特集に負けない企画に取り組みようと、白井先生に大変なご迷惑をお掛けしながらも創薬インフォマティクスの特

集ができました。この場をおかりして、あらためてお礼を申し上げますが、これからもよろしくお願い致します。(榊原康文)

編集後記も9回目ともなると、さすがにネタも尽きて参りました。といっても、天気・季節ネタと年齢ネタしか使っていないので、自らの話題の少なさを嘆かざるを得ません。飲み会のネタなら結構あるのですが…。(鈴木麻子)



すでにある未来へ



科学技術の未来を切り拓く

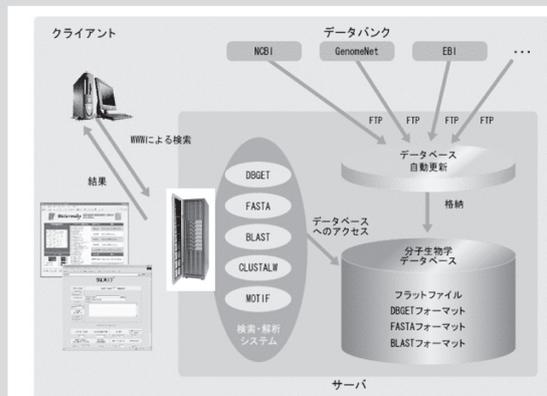
# 日本SGIサイエンス・ソリューション

## ■ 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・インタ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的にサポートします。

※BioSerendipは京都大学との共同開発ツールです。



### 特長

#### 経済性

- ・アカデミック環境で開発されたシステムであるため、非常に安価にシステム構築可能
- ・商用ソフトを必要としない

#### 堅牢性

- ・京都大学でのノウハウがベース
- ・冗長性の実現

### BioSerendip

#### 柔軟性

- ・インタプリタ言語をベースにしているためカスタマイズが容易
- ・システムリソースに応じた環境設定

#### 汎用性

- ・およそ30もの代表的なバイオデータベースに対応 (KEGGにも対応)
- ・テキストベースのシステムであるため、他のソフトウェアとの連携が容易
- ・IRIX®およびLinux®に対応

## ■ ホモロジーモデリング

### 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高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シリーズとして製品化いたしました。

※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

- ホモロ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方法
- Webユーザ・インタフェース

## ■ 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挙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）泰地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165GFLOPS）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。



### 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:0120-161-086(フリーダイヤル)  
<http://www.sgi.co.jp/solutions/science/>