



日本バイオインフォマティクス学会ニュースレター 第17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
[特集:Peta, peta $\cdots 10^{15}$ flops コンピューティングの聲音]	2
[研究会の活動報告].....	9
[地域部会の活動報告].....	11

[リレー紹介:日本のバイオインフォマティクス研究室].....	12
[学会からのお知らせ].....	13
[学会の現況].....	14
[編集後記].....	16

卷頭言

日本バイオインフォマティクス学会会長の就任にあたって

図らずも日本バイオインフォマティクス学会の第6代会長に就任することになり、はや半年近くが経とうとしています。このような大役は自分自身には正直荷が重いのですが、年齢的には学会員の中で最高齢の部類に入るでしょうから、少しでも恩返しができればと考えてお引き受けすることとしました。

バイオインフォマティクスは様々な科学分野の中でも今日最も動きの著しい分野の一つであるとみなされています。しかし、1999年に起草された学会の設立趣意書をあらためて読み直してみると、いくつかの数値さえ入れ替えれば今日の状況にそのまま当てはまることにむしろ驚かされます。すなわち、スケールの拡大はあっても、バイオインフォマティクスの果たすべき役割はこの10年間本質的に変わらないと言えます。新世代シーケンサーやクロマチン免疫沈降法に代表される新技術の開発に伴って、データの蓄積が今後ますます加速することは明らかです。一方で、要素間の相互作用や階層性、経時性に配慮したより高次で複雑な生命現象の解明に向けた取り組みへの期待も大きいと思います。生物学が本質的に情報学であるとの認識に立てば、生命科学全体の中でバイオインフォマティクスが今後ますますその重要度を増していくであろうことは自明のことのように思われます。

しかし、本学会を取り巻く現状にはいくつかの課題が残されていることも事実です。学会の活動の中で最も比重が大きいものは

年会の開催です。学会の発足以来同一のスタイルを保っていますが、昨年度からGIWと独立して開催されるようになったこと、GIW、APBCなどの多くの関連国際学会が設立され、中にはJSBi年会とほぼ同一時期に開催されるものもあることなど、今後その開催時期や形態を、総会のあり方とあわせて、見直す必要が出てくるかも知れません。若い世代の流入を増やすことも大きな課題だと思います。そのためには、研究内容が魅力的であることはもちろんですが、実質的な進路の決定が年々前倒しになっていく傾向が見られる現状では、大学教養課程の学生、あるいはもっと若い高校生などにバイオインフォマティクスへの興味を訴える努力も必要かと思われます。一方で、賛助会員をはじめとする企業、産業界に有用な情報をどのように提供していくべきかも引き続き心していくなければならないことです。いずれも重い課題で、在任中にどこまで達成できるかははなはだ心許ないところですが、無理のない範囲でポチポチと取り組んでいきたいと考えています。



後藤 修（京都大学大学院情報学研究科）

特集:Peta, peta… 10^{15} flops コンピューティングの聲音

■ 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトとライフサイエンスにおけるグランド・チャレンジ

姫野 龍太郎(理化学研究所)

1. はじめに

バイオインフォマティックス分野でもコンピュータの処理能力の影響は非常に大きいことは皆さんも実感されていることと思う。2006年に制定された第三期科学技術基本計画で我が国は、スーパーコンピュータの開発とその応用技術は国家基幹技術とした。これにより、世界最速規模のスーパーコンピュータを開発し、その大きな処理能力をいろいろな科学技術分野に利活用して学術や産業の競争力を強化すると同時に、その開発の過程で培われた設計製造技術をさらに広く家電や携帯電話などの製品に発展させて、日本の産業競争力を強化するというシナリオができた。これを受けて理化学研究所では2006年度から次世代スーパーコンピュータの開発を開始した。この開発プロジェクトの中には、1) スーパーコンピュータの開発とそれを中核とする教育研究拠点の整備、および2) ライフサイエンスとナノサイエンスのグランド・チャレンジとしての応用ソフトウェア開発がある。この応用ソフト開発では、ナノサイエンスに関しては分子科学研究所が、ライフサイエンスに関しては理化学研究所がそれぞれ中心になり、日本中の主立った研究者の協力を集めて開発に当たっている。ここでは次世代スーパーコンピュータ開発の概要とライフサイエンスでのグランド・チャレンジについて紹介しよう。

2. 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト

現在開発している次世代スーパーコンピュータは図1に示すように2011年4月から部分稼働、2012年3月末完成を目指している。その演算性能は、LINPACKと呼ばれる線形の連立方程式での

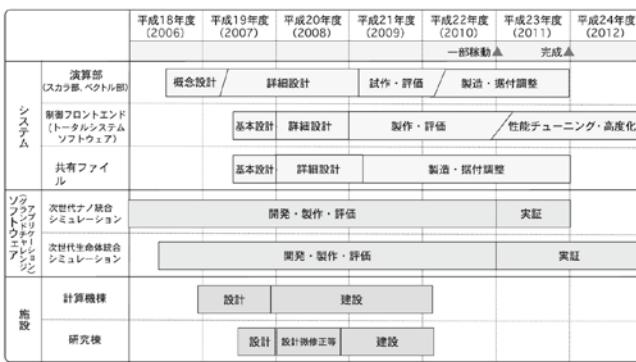


図1 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト計画日程

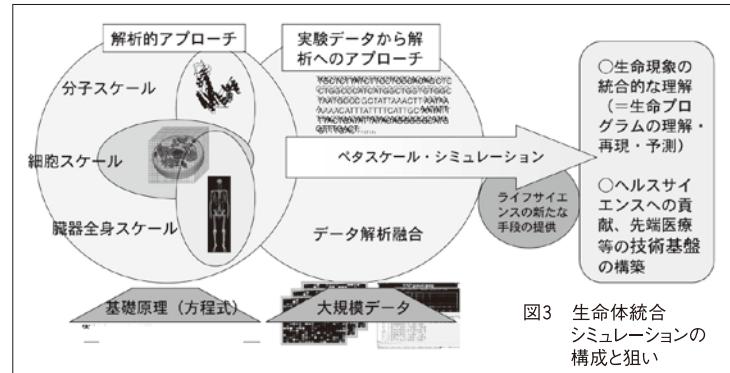
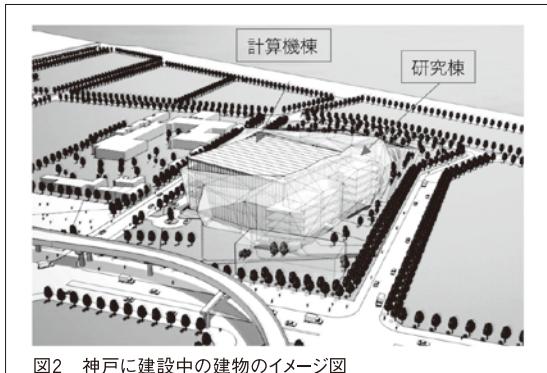
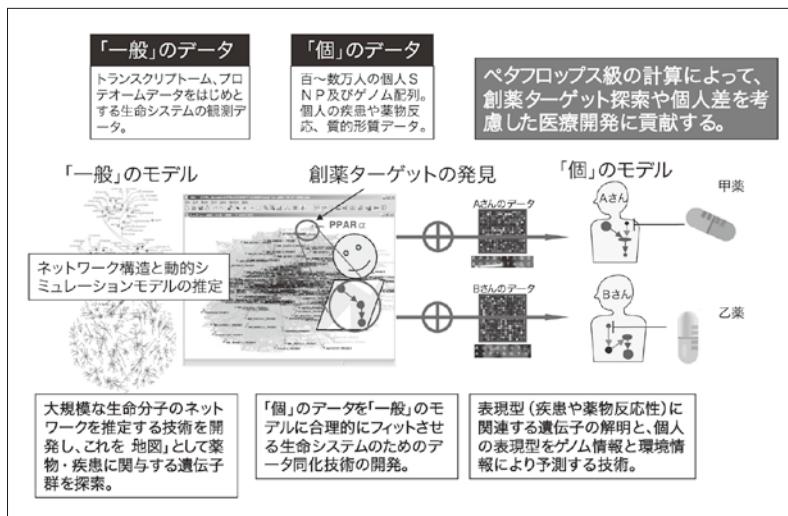


図3 生命体統合
シミュレーションの
構成と狙い

■ データ解析融合研究

宮野 悟(東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター)

「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」におけるデータ解析融合研究開発チームの開発している技術は、飛躍的に増大しているゲノムや遺伝子発現データをペタスケールで解析する応用技術と、データ同化(data assimilation)とよばれる技術によりシミュレーションモデルと観測データの融合を図るモデル構築技術です。データ同化は、シミュレーションモデルと現実データとの乖離を埋める技術として、地球物理の分野で発展してきたもので、地球規模の複雑な現象の高精度予測のために、時空間観測・計測データと最先端の大規模なシミュレーションモデルを統合し、適切な初期値・境界値やパラメータ等を実際の現象をなるべく再現するように決める技術です。これらの技術は、ペタスケールの計算能力があつてはじめて実現できるもので、今後の生命科学・医学研究において極めて重要な技術になると考えています。飛躍的に増大するシーケンサーや、DNAチップをはじめとするハイスクロープット計測で得られる様々なデータを使い、データ同化技術によるデータ駆動型の大規模データ解析及びシミュレーション技術を開発し、ペタスケールデータ解析とシミュレーションの融合に基づく、個人差を考慮した投薬量・最適投与プロセスなどの開発、大規模タンパク質ネットワークや遺伝子ネットワーク推定による創薬ターゲット・毒性関与パスウェイ探索等で役立てることを目指しています。



このチームは、「大規模遺伝子ネットワーク推定とその応用」(東京大学医科学研究所・宮野悟)、「大規模ゲノム多型と表現型データを関連付ける新規アルゴリズムの開発と、妥当性、有用性の検討」(理化学研究所ゲノム医科学センター・鎌谷直之)、「生命体シミュレーションのためのデータ同化技術の開発」(統計数理研究所・樋口知之)、及び「タンパク質間相互作用ネットワークの推定とその応用に関する研究」(東京工業大学理工学研究科・秋山泰)の4つの研究から構成され、「肺癌と薬」という共通の視点をもって研究を進めています。そして、以下のようなソフトウェアを開発しています。

1. ヒトの全遺伝子・転写産物を対象したネットワーク解析を可能にする大規模遺伝子ネットワーク推定ソフトウェア
2. PPIチャレンジ: 1000×1000の超大規模計算を可能にする網

羅的タンパク質間相互作用推定ソフトウェア(タンパク質ドッキング解析プログラム)

3. 1人あたり50万SNPを用い、疾患と遺伝子の関連を発見し(GWAS)、薬物反応性を予測するプログラム
4. 「個」のデータを「一般」のモデルに合理的にフィットさせる生命システムのためのデータ同化を柱としたプログラム群
5. 以上を、融合し、統合的に利用活用するためのソフトウェア環境

なぜペタFLOPSの計算が必要とされるのか。単純に計算パワーの点からどのような困難に直面しているかについて簡単に紹介します。まず、遺伝子多型の研究では、単純な50万SNPの遺伝子型の数千人規模の計算は100ギガ～1テラFLOPSで計算できます。サンプルの構造を50万個のSNP遺伝子型データをもとに決定するプログラムがあります。この構造が決定されないと表現型とゲノム多様性の検定や、パラメータの推定が正確に出来ないのですが、これは5000人レベルを対象とすると、1ペタFLOPSが必要となります。次に、データ同化の現状は、地球物理関係のとでも工夫を凝らしたモデルで、パラメータ数を20程度に落とし、200万次元、粒子数1500個、データ800次元、データ数100ポイントの計算を1.3テラFLOPSのコンピュータで1日かかるとなっています。ペタスケールだとこれが1秒で可能になり、この技術

をネットワーク推定や臓器全身シミュレーションなどで、個人化に応用できるようになります。また、生物の時系列データのように時点数が少ない場合、1億～10億の粒子を使うと、パラメータの推定に道が開けることなどがわかつてきました。複雑な並列化は必要としませんが、単純に計算パワーが必要です。さらに、ネットワークという分子インターラクションの地図を作る問題では、次のような困難があります。創薬で興味の深いタンパク質(10万種の中から、その1%に当たる)1000種に絞ったとしても、1000×1000のタンパク質相互作用総当たりの評価では100万組の計算が必要で、BlueGene (1/2ラック)で50年かかります。これが1ペタFLOPSだと2ヶ月で計算できます。また、数百の遺伝子ノックダウンと薬剤応答のマイクロアレイ解析データから、遺伝子を1000遺伝子(

ヒト全遺伝子の5%程度)に絞り込んでペイジアンネットワークを推定する計算は、128CPUのPCクラスターで数週間かかっています。今後、大規模に出てくる遺伝子発現データを対象に、数万から十数万の遺伝子転写産物をネットワークとして解析することは、計算パワーと手法の点から不可能になっています。そのため、新たなネットワーク解析の手法を開発と数ペタFLOPSの計算能力が必要になっています。

今後、数百テラから数ペタFLOPSのスペックが全世界に普通に登場してきます。東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターでも、2009年1月からピーク性能で75テラFLOPS、2011年1月からは225テラFLOPSのスペックが稼働します。ペタFLOPSの計算で、デスクトップPCで計算する世界とは異なった別世界が見えてくることが期待されています。

■ 基盤ソフトウェア

泰地 真弘人(次世代計算科学研究プログラム

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム)

高性能計算機の並列度は年々上昇しており、最近では10万を超す並列度を持つ計算機もいくつか登場している。高性能計算の現状の指標であるTop 500 Supercomputer sitesの2008年6月のリストでは、2,000プロセッサ以上のものがその半数以上を占めるようになった。例えば同リストで一位であるロスアラ莫斯国立研究所のRoadrunnerには、12,960個のIBM PowerXCell 8iプロセッサと6,480個のAMD Opteronプロセッサが搭載されており、さらに前者にはプロセッサあたり8個の計算コアが、後者には2個の計算コアが内蔵されているので、合計での並列度は10万以上になる。次世代スーパーコンピュータにおいても、全体を使うには10万から100万規模の並列化が必要になると考えられる。アムダールの法則を考えると、10万並列で性能を引き出すためには、プログラムの総実行時間中0.001%程度しか並列化できない部分があつてはならず、その他の99.999%は並列実行される必要があるという厳しさである。問題の規模を大きくできるなら並列度を達成するのは比較的容易になるが、なるべく計算規模を小さく保ったまま並列実行の効率を向上させるとなると困難な作業になる。また、様々なレベルでの並列化が必要になってきたのが近年の特徴である。メモリを共有しないノード間の並列化、メモリを共有するプロセッサ間での並列化、キャッシュメモリを共有するプロセッサコア間での並列化、コア内のSIMD演算などの並列演算器での並列化などのレベルがあり、最適な並列化の実現のためににはそれぞれのレベルに特化して並列化を行う必要がある。GPUなどの高並列プロセッサの台頭により、並列度上昇と並列レベルの多層化という傾向は今後も一段と進行することは間違いないであろう。生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームの第一の目標は、ライフサイエンス分野でのシミュレーションにおいて、こうした大規模並列計算を実現すること、またそのための技術的な支援を行うことである。このようなことは従来であればアプリケーション開発者自身が行ってきたことが多かった。しかし上述のような大規模・多レベルでの並列化となると、ハードウェアやソフトウェアに関する十分な知識も必要になり、高性能化自体に研究的な要素が増えてくる。このような考え方のもとに、ライフサイエンスへの応用を意識しながら、その中の高性能計算および計算機科学に軸足を置いて活動を展開する方針で、現在研究開発を進めている。

具体的な活動内容としては、まずターゲットを絞った「計算コア」を高速化するためのソフトウェア開発がある。特に分子スケールで行っている分子動力学計算・量子化学計算、臓器全身スケールで行っている流体・構造連成計算に焦点をおき、アプリケーションの大規模並列化を行っている。例えば分子動力学計算では、並列化を抜きに考えた場合にはソフトウェアは比較的単純であるため、計算の骨格部分のみを一から新規開発している。今後の大規模並列化に適合させるために、例えば長距離力計算においてはマルチグリッド法や高速多重極展開などの取り入れ、短距離力においては中立領域法などの取り入れなどを進めており、各種アルゴリズムの並列性能比較を行いつつ開発を進めていく予定である。分子動力学計算のライフサイエンス応用では、系の大きさを留めて計算時間を延ばしたいという欲求が多い。そのためには、1コア1粒子といった究極の並列化を実現する必要がある。実際にはハードウェアやOS、通信ライブラリなどの仕様にも左右されるため、実現できるかどうかはわからないが、この究極の並列化を目標に据えて開発を進めている。次世代スーパーコンピュータの利用が可能になった時には、通信ライブラリなどの見直し等を通じたレイテンシの低減など、低レベルの詳細まで踏み込んだ最適化を行ない、実現に努力したい。

こうしたコアソフトウェアの開発と共に、基盤ライブラリ・可視化ソフトウェアの開発も行っている。特に細胞スケール、臓器全身スケールでの階層連結シミュレーションのため、基盤となるライブラリなどのミドルウェア開発を行うと同時に、次世代スーパーコンピュータ上で可視化ツールを開発している。

最後に、次世代スーパーコンピュータの医薬・健康産業、食品産業等での産業応用を図るために、産業連携を推進している。例えば現在、企業からの提案をもとに仮想薬剤ライブラリの開発を東京大学工学部の船津研究室の参加のもとに進めている。ケモインフォマティクスの手法により合成可能性・薬剤らしさ・多様性をもつ仮想化合物を10億程度そろえたライブラリを開発する予定である。これらのライブラリもそれをスクリーニングする手法がなければ意味がない。そこで、分子シミュレーションまで含めたスクリーニング手法を確立した後、ワークフローツール上にそれを用いたパイプラインを構築して産業利用に供する予定である。

■ 分子スケール研究

木寺 詔紀(横浜市立大学大学院国際総合科学研究所、理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム)

次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおける分子スケールの研究開発は、分子シミュレーション(量子化学計算、分子動力学計算、粗視化モデル計算の3つの階層の方法)を用いて、タンパク質を中心とする生体分子系(タンパク質、脂質、核酸、糖鎖、等)の生物機能を理解、さらには予測、制御にまで発展させることを目的としている。ここでは「機能」という言葉の意味を通してその概要を解説してみよう。

バイオインフォマティクスにおける主要な「分子機能」の表現は、

データベース中の注釈情報である(タンパク質であれば例えばUniProtにおけるannotation)。多くの場合、多数のタンパク質が互いに共役して作り出す「細胞機能」の一端をその分子が担うものとして記述されている。これはシステム生物学における、多数のタンパク質が作り出すネットワークの記述方法に対応している。分子シミュレーションでは、取り扱い得るタンパク質分子の数が限定されているために、そのようなネットワークの総体ではなく、そのうちのサブグラフとしてのわずか数分子程度までのタンパク質とその複

合体が関わる素過程に注目することとなる。ネットワークという描像をそのままに採用すれば、素過程としての数分子のタンパク質の働きは、「特異的な入力を特異的に変調し出力するトランスデューサ」として概念的に捉えることができるだろう。たとえば受容体の場合、ある作用物質を入力として、情報の流れの下流にあるタンパク質に出力としての特異的な作用を引き起こす。このように、特異的入力に対して正しく出力を発生することができる、一般論としてのタンパク質の機能であると解釈することができる。分子シミュレーションでは、実像としての分子の振る舞いの理解を求める立場から、上のような情報科学的機能表現を物質科学の言葉で言い換え、以下のタンパク質機能の定義を用いる。

「基質結合や環境の変化などの外部からの摂動に対する応答として始まる一連の立体構造変化／会合状態変化と化学反応」

ここで、入力は、外部からの系(=タンパク質とその複合体)への摂動として捉える。タンパク質は、摂動によって平衡状態から非平衡状態に移行し、応答としての緩和を開始する。応答として起ることは、タンパク質の立体構造変化やそれに伴う複合体の会合状態の変化や化学反応である。

上の定義に従えば、相互作用ネットワークというグラフで情報科学的に抽象表現される「機能」に物理的な実体を与え、その機能発現過程を原子レベルの詳細から論ずるということが、生命科学における分子シミュレーションの役割であるといふことができる。そうであるとするならば、1分子の問題から、少なくともネットワークのサブグラフにあたる、多数タンパク質が相互作用により離合集散して機能発現をする様子をシミュレーションで捉えることが我々の目標となる。

上記の機能表現に沿って、タンパク質機能の分子シミュレーションを3つの階層で行う。電子状態を含んだ高精度計算、化学反応のシミュレーションを量子化学計算(QM)で、全原子モデルでの構造変化シミュレーション、自由エネルギーの計算を扱う分子動力学計算(MM)、細胞環境を含んだ巨大系の動態、長時間現象のシミュレーションは粗視化モデル計算(CG)で行う。ここで、我々の想

定している最大の課題は、QM/MM/MM/CGといった異なる階層を接続するシミュレーション方法の確立によって、巨大タンパク質中の化学反応、巨大細胞環境下での自由エネルギー計算、さらに細胞レベルのシミュレーションに接続すること可能にすることにある。

計算機性能がペタフロップスレベルになった時の可能性について、分子動力学計算(MD)を例に挙げて、過去からの延長線上に推定をしてみよう。

1GFlops	1985	CRAY-XMP	~10ps	10^3 原子
1TFlops	1997	ASCI-Red	~1ns	10^4 原子
1PFlops	2008	Roadrunner	~1μ	10^6 原子

上は、その計算速度を達成した年と計算機を示している。さらに右の数字は、その年のタンパク質系の長時間、巨大と言われたMDシミュレーションがどの程度の時間、規模でなされたかの目安を示した(これら二つの数字は同時には実現されていないが)。この間の変化は、ここに示した計算規模の拡大と計算精度の飛躍的な向上がある。さらにもうひとつの大きな変化は、シミュレーションの目的の変化にある。小規模、短時間のシミュレーションの多くでは、物理的な振動解析、平衡ゆらぎの分布解析をゴールとして設定していたものが、より長時間、大規模のシミュレーションが可能になることによって、生物学として設定された問題に答える事ができるようになってきている。その意味で、分子シミュレーションは、生体分子を巨大高分子として扱う物理学の一分野から、生物機能発現のプロセスの詳細を理解、予測するための生物学の手段に変容してきている。その延長線上にある次世代スーパーコンピューターは、上に述べたように、ネットワークのサブグラフにあたる、多数タンパク質が相互作用により離合集散して機能発現をする様子を高精度のシミュレーションで捉えることを可能とし、重要な生物学への寄与を可能とするものと期待される。

■ 細胞スケール研究

横田 秀夫(理化学研究所)

はじめに

細胞スケール研究開発チームの研究目標は、生命の最小単位である細胞を対象に、その内部や複数細胞間で生じている現象を再現することである。しかしながら、細胞内で生じている現象は、ほとんど解明されておらず、その解明自体が細胞生物学における最重要な課題である。そのため、細胞内で生じている複雑な現象をすべて再現するシミュレータの開発は現時点では不可能である。そこで、細胞スケール研究開発チームでは、これまでの研究成果により現象が十分理解され、数理モデルの構築がなされた現象を対象に細胞内外でのシミュレーションの実現を目指した。さらに10Peta Flopsの能力を持つ次世代スーパーコンピュータの計算能力を生かし、これまで計算コストの問題から計算ができなかった細胞内の場を考慮したシミュレーションの実現を目指している。具体的には細胞内を格子状の空間座標によりメッシュ状の位置情報を付加し、その各セル内において種々の細胞内シミュレーション

を実装することにより、細胞内のオルガネラの空間を有する不均一な場を考慮したシミュレーションを実現する(図1)。さらに、細胞シミュレーションの対象は、今後の細胞生物学、数理モデル構築、シミュレーション技術の進展に伴い、大幅に拡張されることが想定される。そこで、個別に特化したシミュレーションを実現するのではなく、複数の事象に対するシミュレータを接続してお互いの現象を連成して解析できる細胞シミュレーションプラットフォーム(RICS)を開発し、今後の細胞シミュレーションの展開にも寄与出来る様に設計した(図2)。

また、本チームで開発する細胞現象のシミュレーションは、コンピュータの中で計算が走ることではなく、実際の細胞内で生じている現象を再現することを目指している。そのため必要なシミュレーションのためのパラメータの取得、シミュレーションの検証のための実験も併せて行い、現象の再現を超えた未知の現象の推定に資するシミュレーションの実現を目指している。

研究体制

本研究チームでは、RICSをベースに複数の事象のシミュレーションを連成して解析することを目指している。そのため、細胞内の現象の数理モデル構築に実績のある拠点と連携して研究を推進している。慶應大学拠点では、細胞内のエネルギー・酸素代謝のシミュレーションを基に、細胞内の場を考慮したシミュレーションに拡張すると共に、細胞内の物質の存在状況をモデル化する。また、肝細胞を対象に細胞集団を対象とした「小葉シミュレーション」の実現を目指し、臓器内の細胞の位置や極性による代謝特性の違いを勘案した細胞集団シミュレーションの構築を進める。大阪大学の拠点では、細胞膜を介した水・イオンの移動を対象としたシミュレーションを構築し、細胞膜機能の実現を目指す。神戸大学の拠点では、インスリン分泌細胞である β 細胞を対象にしたシミュレーションを基に、場を考慮したシミュレーションへの拡張を図り、細胞内の分泌小胞の移動、開口分泌についてのシミュレーションを実現する。東海大学の拠点では、血小板内の代謝により凝集因子の状態、局在が変化することを再現したシミュレーションを開発する。これらのシミュレータを理研に於いてRICSに追加すると共に、細胞内の物質の拡散の機能を追加して3次元空間における細胞シミュレータの開発を目指している。さらに将来的には、複数の細胞、分化した各種細胞への拡張により、薬剤反応についてのシミュレーションの実現を計画している。

細胞シミュレーション統合プラットフォーム

RICSは、細胞を一辺100nmの直行格子の空間に記載し、その立方体の空間毎に異なる属性（オルガネラ）、化学反応（代謝）、物質の量を記述する。また、この空間は大規模並列処理の際の領域分割に利用することが可能である。これまでに、代謝、拡散の機能の実装が終了し、現在、膜機能の設計と大規模並列処理を目指した開発を進めている。代謝シミュレーションには、細胞シミュレーションとして実績があるE-cell3を採用した。開発したRICS上で3次元空間(32^3 Voxcel)における反応拡散の連成解析を行った結果を図3に示す。細胞を模擬して複数の媒質（オルガネラ）毎の反応式と物質の初期濃度、さらに、酵素が拡散するモデルを設定した。拡散なしの計算では、個々の媒質内で反応により物質の濃度が変化する様子が計算された。さらに、物質の拡散に伴い、反応の場が変化し、物質の3次元局在が変化することが再現できた。これらの結果から、細胞シミュレーションプラットフォームとその拡散機能追加により、不均一な場を持つ反応-拡散の連成計算の機能を実現できたと考える。

おわりに

細胞内の空間や複数の事象に対する連成解析のシミュレーションプラットフォームの開発を進めている。今後は開発したシステムを用いて、細胞現象の再現や検証を進める予定である。構築したシステムは直交格子と

時間ステップ毎に計算を連成するシステムであることから、新たな事象のシミュレーションと容易に連携することが可能である。細胞

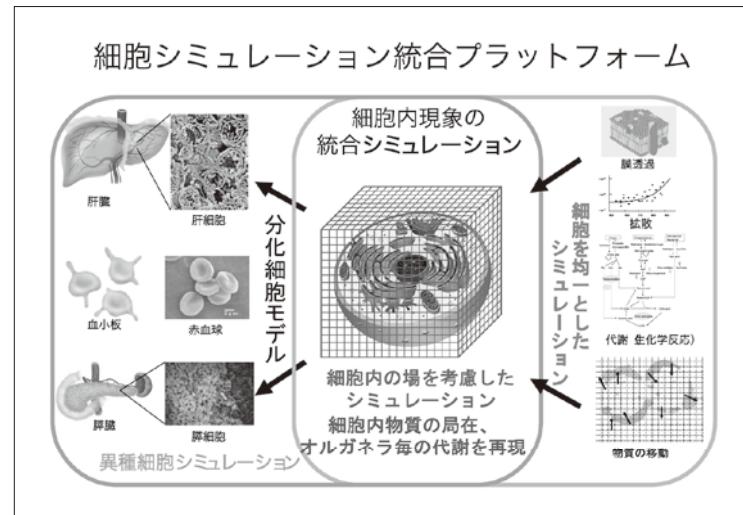


図1 細胞シミュレーションプラットフォームの概念図

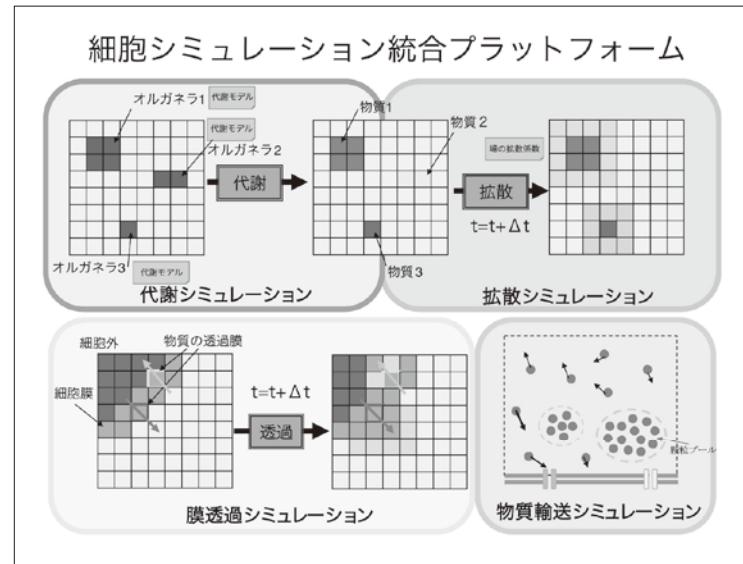


図2 細胞シミュレーションプラットフォームでの連成解析

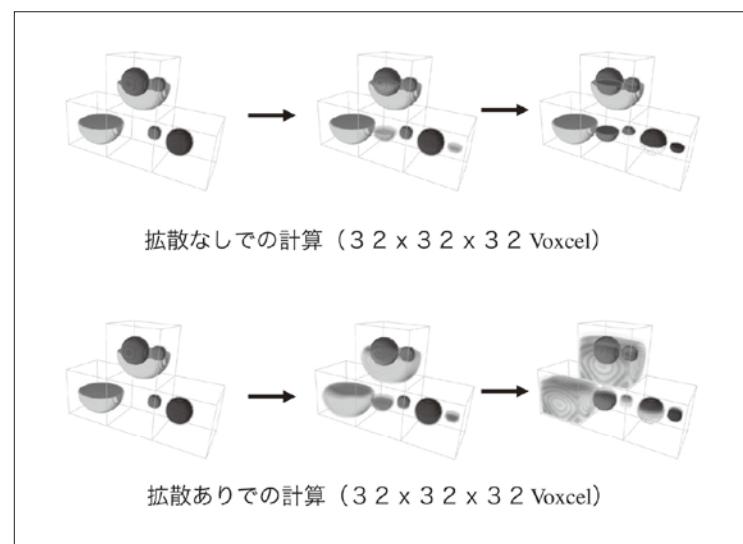


図3 Voxcel空間における反応拡散連成解析結果

岐にわたることから、現在のチーム体制ではごく一部の現象の再現に過ぎない。今後進むであろう新たな数理モデル、シミュレーションと連携して、より現実に近い細胞シミュレーションを実現していく

たいと考えている。さらに、このチャレンジングな研究に参加いただける意欲ある研究者の参加を切に希望する。

■ 臓器全身スケール研究 臓器全身マルチスケールシミュレータの構築に向けて

高木 周(理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム)

ここでは、「臓器全身スケール研究開発チーム」にて行なわれている研究開発について紹介する。生体内の臓器の挙動に対するシミュレーション技術の開発は、高齢化社会においてより深刻な問題となる様々な疾患に対する高度医療を達成するために、極めて重要な意味を持っている。本研究開発チームでは、生体内で起こる種々の現象を理解し医療に結びつけるため、循環器系、筋骨格系、種々の臓器、呼吸器系、神経系を備えた人体モデルの構築を目指す。CT、MRI、超音波画像診断機等により獲得された各個人の人体ボクセルデータをベースに、各種病態のシミュレーションと治療支援ツールの開発を行うことを目標としている。現時点では、チーム内を5つのグループに分けて研究を推進しており、プロジェクトの進行とともにそれらが統合されたマルチスケール人体シミュレータの構築を目指している。5つのグループの研究内容について以下に簡単に説明する。()内は、各機関の研究代表者および理研内の担当者)

(1) 全身ボクセルデータ作成の高度化と臓器全身力学モデルの構築 [姫野龍太郎(理研)、野田茂穂(理研)、横田秀夫(理研)、松澤照男(JAIST)、野村泰伸(阪大)、岡澤重信(広島大)]

CT、MRI、超音波画像装置によるデータを基に、各臓器、筋骨格、血管網などを識別・分類し、ボクセルデータ化された人体を構築する(図1参照)。さらに、この人体データを利用して、ボクセルデータ形式に適した流体・構造連成手法を考案し、人体内の血流・臓器から全身スケールまでの動的挙動を計算するソフトウェアを開発している。

(2) 低侵襲治療支援のための照射型シミュレータの構築 [松本洋一郎(東大)、小野謙二(理研)]

本研究はまず始めに、超音波による低侵襲治療を研究対象としてソフトウェア開発を進めている。ボクセルデータ化された人体モデルに対して、人体内を伝播する超音波のシミュレーションソフトウェアを開発することにより、超音波により癌の診断を行い、さらに強力集束超音波HIFU(High Intensity Focused Ultrasound)により腫瘍の焼灼を行う低侵襲治療のための支援ツールを構築する。また、ここで開発される人体ボクセルデータの処理プロセスは、放射線治療など照射型シミュレータ全般への適用が可能であり、本研究では、さらに重粒子線治療への適用を目指して現在ソフトウェアの開発を進めている。

(3) 心臓シミュレータの実装

[久田俊明(東大)、天野晃(京大)]

心臓は臓器の中でも、その力学的挙動が生命活動

にとってもっとも重要となる部位である。本研究では、久田(東大)らが開発を進めている、心臓に伝わる電気的シグナルから心筋細胞が刺激を受け、心臓全体がその機能を発揮するまでを扱うマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの次世代スーパーコンピュータへの実装に向けた準備を進めている。

(4) 血管網の構築と血液循環統合シミュレーション [高木周(理研)、劉浩(千葉大)、大島まり(東大)、山口隆美(東北大)]

血液循環は、生体内における物質輸送・熱輸送の重要な役割を担っている。本研究では、人体ボクセルデータをベースに、心臓から動脈静脈血管系、毛細血管まで血流循環に関して、動的なモデルを構築する(図2参照)。ここでは主に、循環器系全体に対する機能・病態・薬効評価をターゲットとし、循環器統合マルチスケールシ

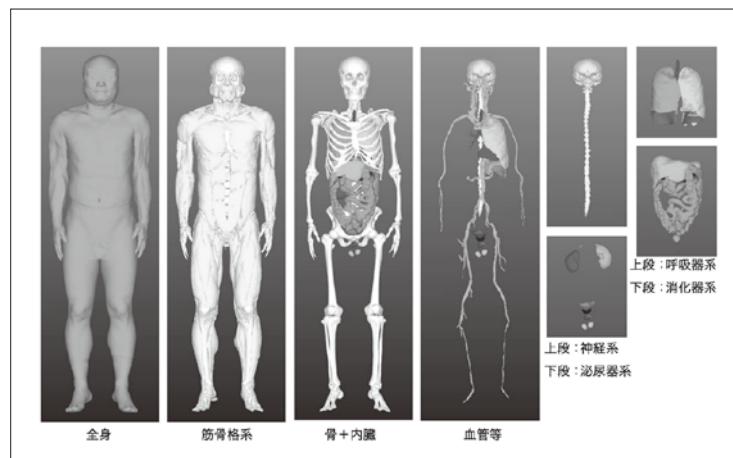


図1 構築された人体ボクセルデータ

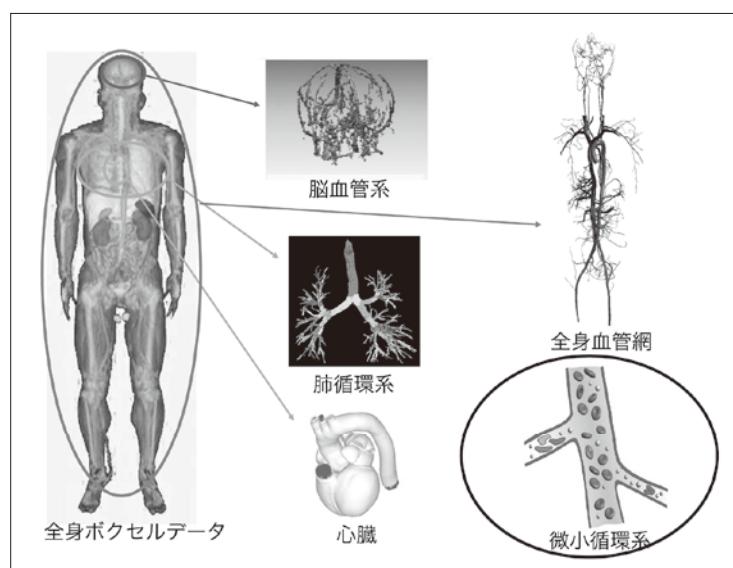


図2 循環器系統合シミュレータのイメージ

ミュレータを開発し、血栓症や脳動脈瘤とその治療法などについて検討を行うためのソフトウェアの開発を進めている。特に血栓症に関しては、細胞スケールチームで開発中の血栓止血シミュレータを本研究で開発する大規模血流計算に取り込むことにより、症例の多い冠状動脈血栓症の解析を行う。

(5) 肺呼吸・肺循環統合シミュレーション [和田成生(阪大)]

本研究では、呼吸器疾患の早期発見と適切な処置、肺機能・循環機能に基づく病態評価、投薬効果の定量的評価、治療後の予

後予測を行うためのシミュレーションによる医療支援システムの構築を目指している。

以上のように、次世代スーパーコンピュータでの計算に向け、ソフトウェアの開発が進んでいる。今後は、チーム内で開発されているソフトウェアの連成だけでなく、他のチームとの連携を図ることにより、多岐に亘るスケールや種々の因子の効果を取り入れ、人体全体の機能を維持させている詳細なメカニズムの解明により近づくことを目指す。

■ 脳神経系研究

石井 信(京都大学大学院情報学研究科、理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム)

1952年にHodgkinとHuxleyはイカの巨大軸索の電気生理学実験に基づき、神経細胞膜の電位ダイナミクスを電気回路(決定論的方程式)としてモデル化し、当時の最先端計算技術であった手回し計算機を用いてシミュレーションしました。モデルを実験に適合させるためにナトリウムチャネルの不活性化などを仮定として導入しましたが、その後実際に、チャネル分子の細胞内アミノ酸側鎖によって不活性化過程が実現されていることが示されました。世界初であり、かつ現在まで全く色あせないシステム生物学研究です。この成功研究は二つの点において示唆的です。第一に、仮説主導型の生物学研究、すなわちシステム生物学研究において、その時代における最先端計算技術が重要な役割を果たしたこと、第二に、歴史的には、計算機シミュレーションに基づく生物学研究を脳神経系が主導してきたことです。

HodgkinとHuxleyの細胞膜ダイナミクスのモデル化は、その後、NEURONやGENESISなどマルチコンパートメントモデルのシミュレーションを可能とするフリーソフトウェア開発へと発展しました。また、GENESIS上で動作する、生化学シミュレーションのためのツールボックスKinetikitも開発されました。これらは、脳神経系がシミュレーションに基づく生物学研究の中心であり続けてきた過去の歴史を物語るものです。

欧米では、脳神経系のシミュレーション研究はさらに大規模化が進んでいます。スイスのEcole Polytechnique Federale de Lausanneでは、IBM社の全面協力の下で、2005年6月よりBlue Brain Projectを実施しています。2007年には、IBM Blue Gene計算機を4ラック、8,192個のCPUを繋ぐことで10,000個の神経細胞(マルチコンパートメントモデル)からなる大脳皮質機能コラムをシミュレーションすることに成功しています。一方、米国では、Pittsburgh Supercomputing CenterとSalk Instituteが、神経細胞の詳細な三次元モデル化とシグナル伝達分子の一分子レベルでの動態のモンテカルロシミュレーションを可能とするMCellプロジェクトを実施しています。

残念ながらわが国は、これまでの計算科学に基づく脳神経系の研究において、欧米の後塵を拝してきました。次世代スーパーコンピュータの開発に伴って、わが国独自の構想による、計算科学と大規模計算機シミュレーションに基づく脳神経系研究をスタートさせなければなりません。理化学研究所のリーダーシップの下で、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの中に脳神経系研究開発チームの設置が提言され、2008年10月に研究をスタートする運びとなりました。

これまでの欧米における研究は、脳のマクロな機能である、外界

からの情報をいかに処理するのかという計算論をとりあえず無視し、神経回路や神経細胞のミクロな動態の再現こそが脳神経系における機能素子の役割の解明につながるというドグマの下で進められてきました。わが国の研究チームでは、まずこの構成論的な立場に立ったドグマを見直し、計算論的(帰納的)な立場を取り入れることが重要であると考えました。すなわち、脳は全体として、外界である環境との相互作用の下で動作し、かつ動的な環境に適応しながらその動作を変化させる情報処理・学習機械であると考えられます。したがって、その素子である神経回路や神経細胞は、環境との相互作用と適応の過程で動的に役割が決まります。しかし、人間の脳は少なく見積もっても100億個の神経細胞からなり、それら細胞同士の結合状況も、各細胞での種々の機能分子の発現・活性の状況もほとんどが未知です。このような複雑系のモデリング、およびそのモデルをリアルな外的環境下でシミュレーションすることは事実上不可能であり、状況に制約を加える必要があります。そこで、われわれのチームでは、ほ乳類(特にヒト)の視覚系と、無脊椎動物(特に昆虫)の嗅覚系に標的を絞って研究を実施することにしました。次世代スーパーコンピュータの稼動時までに、 10^5 個の神経細胞と 10^6 個の細胞間結合からなる大脳皮質の局所回路の動態の再現と、その局所的学習機能の再現、また、単一神経細胞内で学習および発達に関わる分子群の一分子レベルでの時空間動態の再現を目標に、そのためのソフトウェアを開発する予定です。さらに、並行して研究を進める網膜モデル、眼球運動モデルと関連付けることで、視覚系全体における環境との相互作用のシミュレーションを可能にします。一方、昆虫の嗅覚系は 10^5 個と比較的少数の神経細胞からなるため、当初より、マルチコンパートメントモデルの結合系としてシミュレーションできるようなソフトウェア環境を開発していきます。

以上の研究開発を、理化学研究所を中心的研究機関、京都大学と東京大学を研究実施機関とし、沖縄科学技術大学院大学、奈良先端科学技術大学院大学などの協力を得て実施する予定です。また、この研究開発を通して、計算科学と脳科学との新たな融合領域である「計算脳科学」の将来を担う研究者の育成にも注力したいと考えております。本稿の読者の中で「われこそは」と思われる方の研究参加にも大きく期待する次第です(本稿執筆の9月26日現在で博士研究員の公募を行っており、引き続き随時公募を実施する予定です)。

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(九州工業大学大学院情報工学研究院)

毎年度、4回の研究会を開催することを目標に活動しています。2回はテーマを絞って首都圏で開催し、他の2回は、バイオインフォマティクスに関心のある各地の研究者と協力しながら開催させていただいている。今年度は、横浜で6月に開催したので、その報告と今後の3回の研究会予定について連絡させていただきます。

6月27日(金)、理化学研究所横浜研究所で、第19回システムバイオロジー研究会を開催させていただきました。「生物におけるネットワーク制御の戦略と進化」というテーマで研究発表を行いました。生物反応の構造や相互関係に関する知識の集積に伴い、生命現象を維持するための基本的な構造は生物の種類に関わらず、保存されていると考えられるようになっています。頑強かつ柔軟な、生物のたおやかなシステム特性にはいったいどのような戦略が用いられているのでしょうか。そのような疑問を焦点に、生物進化、ネットワーク、分子制御をキーワードに研究会を開催しました。3件の招待講演、(1)「形づくりの遺伝子ネットワーク進化:節足動物の体節形成」藤本仰一(JST ERATO複雑系生命)、(2)「機能を失った遺伝子の進化—偽遺伝子の生物学的意味」楓田葉子(総合研究大学院大学 生命共生体進化学専攻)、(3)「小分子RNAの解析から解明した偽遺伝子の新しい機能」十時泰(理化学研究所基幹研究所システム計算生物学研究グループ)と、3件の一般講演を行いました(写真参照)。50名以上の参加者と活発な討論を行った後、20名弱の参加者とビヤホールで懇親会を開き親睦を深めることができました。

今後は、10月3、4日、北海道北見工業大学において、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で、第20回システムバイオロジー研究会を開きます。「地球環境のための生物プロセス工学とシステム生物学」というテーマで、地球環境

の視点からプロセス工学やシステム生物学を考えます。地球環境の先端的研究開発について議論しながら、システム的アプローチの基礎と応用を理解して、積極的にシステム生物学を取り入れるきっかけとなる機会を設定させていただきます。もちろん、北海道における独自の環境問題への取り組みを知ることは、地球環境問題の全体を理解し、科学者、技術者として、基本的な知識や技術を学ぶ機会ともなります。研究会修了後、有志による企画も用意します。

年度末には、立命館大学、癌研究会での開催を予定しています。開催組織の特長を生かした話題を提供させていただきます。本研究会では、我々運営委員のほかに、開催地での研究者にはたいへんお世話になっています。研究会が継続できるのは、このような皆様方の協力の賜物ですので、感謝の気持ちを表したいと思います。今後ともよろしくお願い申し上げます。



第19回のシステムバイオロジー研究会、RIKEN横浜において

■ 創薬インフォマティクス研究会

主査 広川 貴次(産業技術総合研究所生命情報工学研究センター)

アステラス製薬(株)の白井先生より本年度から創薬インフォマティクス研究会の主査を引き継ぐことになりました。産総研CBRCの広川と申します。副査には同じく産総研CBRCの本野千恵さん、そして運営委員に興和(株)の中嶋久士さんに協力ををお願いし、本研究会を運営していくことになりました。皆様どうぞよろしくお願いいたします。

本研究会が発足された2004年のニュースレターに掲載されて

おりました白井先生の記事には、「「インフォマティクス駆動型創薬」の時代を切り開く推進力となる研究会」というスローガンが掲げられておりました。白井先生をはじめ、これまで会の運営に携わってきた方々、ご講演された先生方のご尽力により、「インフォマティクス駆動型創薬」は確実に認知されており、創薬の現場においてもその技術は有効利用されていると感じます。新しい運営委員でも引き続きこのスローガンの下、研究会等を通じて創薬

インフォマティクスの推進、啓蒙活動を行いたいと思います。

研究会開催については、本年度末までに2回ほどの開催を予定しております。研究会の内容については、従来の通り最新の研究動向や特定のトピックをテーマに研究講演会および討論を設ける形式の他、人材育成のための集中講義的な内容も予定しています。後者については、科学技術振興調整費の支援の下、産総研で実施している創薬インフォマティクス技術者養成コース(生命情報科学技術者養成コースの一つ)での経験を活かし、社会人

だけではなく、大学院生にも広く参加できるよう、創薬に必要なバイオインフォマティクス、ケモインフォマティクスの概論を中心とした内容で準備を進めています。開催場所も地域部会と連携しながら広く開催できるような企画にしたいと考えています。

上記以外でも新規企画やアイディア、研究会で取り上げてほしいトピックなど、会員の皆様からの幅広いご意見・ご要望を研究会の運営に反映させていきたいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。

■ 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工学研究センター)

第5回オントロジー研究会を平成20年10月28日(火)に理化学研究所の桝屋啓志先生と豊田哲郎先生を講師に迎え東京大学医科学研究所で開催します。理化学研究所におけるオントロジー研究と実践の取り組みについて実験系と情報系の両方からお話ししていただきます。本稿が皆様のお手元に届く頃には、既に開催日が過ぎているかもしれません、もしまだの場合は皆様のご参加を

お待ちしています。具体的な内容については次号以降に報告する予定です。平成20年度はもう1回開催を予定しています。テーマとしては、データベースを構築している方に集まっていただき、アノテーションや他のデータベースとの関連付けなどに関して議論したいと考えています。

■ アグリバイオインフォマティクス研究会

主査 清水 謙多郎(東京大学大学院農学生命科学研究科)

アグリバイオインフォマティクス研究会は、平成20年7月15日、東京大学において、第1回研究会を開催した。今回はとくに初回ということで、食、環境、生命に関わる農学分野のバイオインフォマティクスとその利用について、実験系からフィールド系、分子・細胞レベルから環境レベルまで、幅広い話題を取り上げ、個々の問題を理解し、この分野の今後の展望をはかることを目的とした。そのため、招待講演を中心とし、農学の各研究分野の第一人者の方に発表をお願いした。プログラムは以下の通りである。

- 13:00 「アグリバイオインフォマティクス研究会について」
東京大学大学院農学生命化学研究科 清水謙多郎
- 13:10 「環境耐性作物のゲノム育種」
東京大学大学院農学生命科学研究科 篠崎和子
- 13:35 「昆虫のゲノム情報から読み取る植物への適応戦略」
東京大学大学院農学生命科学研究科 嶋田透
- 14:00 「微生物ゲノムとインフォマティクス」
東京大学大学院農学生命科学研究科 西田洋巳

14:45 「ニュートリゲノミクス研究におけるDNAマイクロアレイ解析戦略と実践」

東京大学大学院農学生命科学研究科 中井雄治

15:10 「分子シミュレーションとアグリバイオへの応用」

東京大学大学院農学生命科学研究科 寺田透

15:35 「食品のおいしさの可視化技術」

食品総合研究所 杉山純一

16:00 「農地情報のリアルタイムモニタリング」

東京大学大学院情報学環・学際情報学府 溝口勝

16:25 「農業・環境分野における機能リモートセンシング」

東京大学大学院農学生命科学研究科 大政謙次

合計 54名の出席者があり、会場からは、インフォマティクス研究者、実験研究者それぞれの立場から、さまざまな質問があり、活発な議論が行われた。第2回研究会は、平成21年3月に開催する予定である。



地域部会の活動報告

■ 東北地域部会

東北地域部会長 中山 雅晴(東北大学病院メディカルITセンター・循環器内科)

地域部会活動報告に先立ちまして、ご報告をひとつ申し上げます。ご存知の通り、本年6月14日に岩手・宮城内陸地震が発生し、最大震度は6強を観測しました。報道が示すとおり震源地付近の被害は甚大でした。被災者の方へは一刻も早い回復と、犠牲者の方のご冥福をお祈りするばかりです。当日、仙台市内でも強力な揺れを感じ、私はちょうど勤務先の東北大学病院においていたので、エレベーター停止のあおりを受け、何人の職員とともに階段を数珠繋ぎに昇っていき、病棟の異常確認をすることとなりました。当然のことながら入院患者や見舞い客の皆さんのが驚きは大きいものでしたが、幸い目立った障害はなく、それは仙台市近郊まで含めても同様で、意外すぎるほど平穏でした。そんななか報道を知り、こちらの安否を気遣ってご連絡を下さる学会員の方もいらっしゃって、大変心強かったです。本学会を通じてよき出会いがあったことを嬉しく思います。この紙面を借りまして御礼申し上げる次第です。ありがとうございました。

さて、いつも申し上げていますように、東北地域部会はバイオインフォマティクス初学者のためのセミナーを中心に活動をしています。今年もいくつかのセミナーを企画しております。私自身臨床を行っており、セミナーに参加して下さる人たちも含め、実際の医療現場に役立つようなテーマに興味がある方が大勢を占めます。もちろん、

バイオインフォマティクスは生物学全般にわたる知見を網羅しているわけですから、学部を問わず参加できる形態を心がけていますが、次回は東北大学医学部教室員会と合同開催で、以下のセミナーを行う予定です。

日 時：10月31日(金)午後6時～8時

場 所：東北大学医学部 第一講義室

① 北海道大学大学院医学研究科 呼吸器内科学分野
(第一内科)

准教授 別役 智子 先生

「LCM—マイクロアレイ法を用いた細胞・組織特異的な包括的遺伝子発現解析～呼吸器疾患の病態解明へのアプローチ～」

② 理化学研究所 オミックス基盤研究領域

副領域長 河合 純 先生

「次世代シーケンサーを用いた細胞機能制御の解明」

詳細が決まりましたら、またアナウンスさせていただきます。今後も、学会員の皆様にはご協力を願っています。

■ 関西地域部会

関西地域部会長 坂田 恒昭(大阪大学サイバーメディアセンター)

関西部会事務局 福岡 良忠、奥村 利幸

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念頭に置き、「バイオメディカル研究会」と名付けた研究会を継続的(2回／年)に3年間に亘り、開催してきました。本研究会では、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、毎回2テーマを順次取り上げていくという方法をとっていました。

第1回研究会(2006年2月24日開催)では上記4テーマの総論講演、第2回研究会(2006年9月12日開催)ではシステムバイオロジー、及びケミカルバイオロジーに焦点をあて、第3回研究会(2007年3月16日開催)ではシステムバイオロジー、及びインシリコ創薬、第4回研究会(2007年9月20日開催)ではインシリコ創薬、及び医療情報、第5回研究会(2008年2月13日開催)では医療情報、及びケミカルバイオロジーでの基調講演・若手研究者による発表・ポスター発表(併催)、そして本年10月8日開催予定の第6回研究会では一順した4テーマ毎に、総括、及び今後を見据えた講演を企画しています。又、3年間の活動結果を省みて、「バイオインフォマティクスが医薬品の研究開発に与えるインパクト(経営学的観点

から)」という演題での基調講演を、原拓志教授(神戸大学大学院 経営学研究科)にして頂くことになっています。

過去3年の間、国内外での製薬企業のM&A、世界中のバイオクラスターの興隆(関西では北大阪の彩都ライフサイエンスパーク、



(写真は第5回研究会におけるポスター発表風景)

神戸医療産業都市の発展)、医薬品市場における生物製剤の増加、iPS細胞開発の衝撃等、バイオ分野での技術革新が経済・社会領域へ大きな影響を与えてきました。関西地域部会の活動も、研究者・企業人・省庁関連者の交流を活発化させることで、バイオ・医療・医薬・地域経済の各分野の発展に、少なからず貢献

が出来たのではと考えております。

関西地域部会では第7回研究会以降を新たなStepとして、新企画を構想中ですので、会員の皆様からの御意見・御希望等をお知らせいただければ幸いです。

■ 中国四国地域部会

中国四国地域部会長 妹尾 昌治(岡山大学大学院自然科学研究科)

本年度の中国・四国地域部会による「次世代バイオマーカー研究会」第4回の開催に向けて現在企画中です。現状ではまだ企画の内容が確定していません。

ここで、あらためて第1回から第3回まで研究会のお世話をいただいている幹事の先生方を感謝の意を表して紹介させていただきます。

太田潤先生(岡山大学大学院医薬学総合研究科)

太田恒孝先生

(株式会社林原生物化学研究所研究センター医薬研究部門)

難波ひかる先生(岡山大学大学院医薬学総合研究科)

第4回目からは、太田潤先生に代わり岡山大学大学院自然科学研究科(農学系)の田村隆先生にお願いする事になりました。太田潤先生には研究会設立時から大変お世話になりました事をここに御礼申し上げます。

また、4回目の企画は田村先生を交えて行っていますが、いましばらくお時間を頂きます。

新しいバイオマーカー研究はますます関心の高いテーマになります。研究会活動を岡山から広島や鳥取へ積極的に場所を移して企画を進めていきたいと考えていますので、今後もご支援のほどどうぞよろしくお願ひいたします。

■ 北海道地域部会

北海道地域部会長 遠藤 俊徳(北海道大学大学院情報科学研究科)

北海道支部会では、5月6日にバイオインフォマティクスセミナーを開催した。講演者および内容は次の通り:小倉淳先生(お茶の水女子大学)「眼の起源と進化:ゲノム・遺伝子発現解析から」、野田彰子先生(産業技術総合研究所)「ヒト組織特異的遺伝子の進化的起源—組織の形態的進化と組織特異的遺伝子の出現数には相関がある—」、また、8月26日から4日間、国際学会Methods in Protein Structure Analysis 2008 (MPSA2008; <http://www.mpsa2008.jp/>)の開催に携わった。またMPSA2008プレカンファレンス「プロテオミクスの最新技術」(<http://www.mpsa2008.jp/>)

preconference_j.html)に北海道大学大学院情報科学研究科GCOEプログラム「知の創出を支える次世代IT基盤拠点」として共催を行った。この秋、JSBi主催としては2回目のバイオインフォマティクス技術者認定試験を札幌でも実施する。会場は北大キャンパス内で工事がおこなわれているため、JR札幌駅、市営地下鉄さっぽろ駅にも近い大学共同利用施設北海道ACU(アキュ; Advanced Center for Universities; <http://www.acu-h.jp/>)を予定している。また、時期未定だが秋頃に北海道支部会セミナーを計画している。

リレー紹介:日本のバイオインフォマティクス研究室

独立行政法人医薬基盤研究所 基盤的研究部バイオインフォマティクスプロジェクト

長尾 知生子(水口賢司研究室)

水口研究室は、大阪北部の彩都を拠点とする独立行政法人医薬基盤研究所に所属しています。彩都は2004年にまちびらきをしたばかりの新しい街で、まだ住宅地の造成が続いているが、私が赴任した1年前よりは店舗や病院が増えて、ずいぶんとにぎやかになってきました。彩都ライフサイエンスパークの一一番奥に位

置する、医薬基盤研究所も新たな医薬品の開発を目指した研究開発を支援するために2005年に創設されたばかりの新しい研究所です。研究所は、1) 基盤的研究、2) 研究開発振興、3) 生物資源研究の3つの主な業務を行なっており、また大阪大学、国立循環器病センターなどから構成される大阪北部バイオクラスターの中

核組織としての役割を担っています。

水口研は医薬基盤研究所の基盤的研究部の8番目のプロジェクト、バイオインフォマティクスプロジェクトとして、2006年10月にスタートしました。研究室では、ゲノム配列、立体構造といった大規模な実験データから、新たな情報を抜き出して、生命機能に関する理解を深め、それらを創薬に応用することを目標に研究を行っています。特に、創薬プロセスにおいて、スクリーニング、ドッキングといった、コンピュータの利用がかなり進んでいるプロセスではなく、その前段階の創薬ターゲットの同定と検証のプロセスにバイオインフォマティクス的手法の応用を目指しています。

構成メンバーは、水口リーダー、秘書、私以外は、研究者、学生を含め、全員がバイオインフォマティクスの盛んなインドからの出身者です。短期ですが、外国からの研究者や学生も頻繁に滞在され、今、注目されている“ダイバーシティ”が豊かな研究室といえるかもしれません。研究室では、日本とインドでの日常生活の違いから研究の話まで、フランクに話ができる雰囲気です。ただ、私だけが英語が苦手でいつも悔しい思いをしています。

研究室で扱っている研究テーマは、基本的な手法の開発と具体的なシステムに関する研究の2つの大きな方針にわけられます。基本的な手法の開発としては、ニューラルネットワークやSVMを用いたタンパク質-DNA間、タンパク質-タンパク質間相互作用の予測法の開発、InterMineを利用した創薬ターゲット同定のためのデータマイニングシステムの構築(NEDOプロジェクト)、酵素の詳細な機能予測法の開発、膜タンパク質の大規模な立体構造変化部位の予測法の開発(JST-BIRDプロジェクト)などを行っています。また、具体的なシステムに関しては、ケンブリッジ大学、大阪大学、京都大学などの実験グループと共同で研究を行っています。黄色ブドウ球菌のビタミンB5合成系酵素の構造解析と阻害剤の開発(国際バリューチェインプロジェクト)や、C型肝炎ウイルスによる

癌の発症と慢性炎症疾患について、発症メカニズムの解明とターゲットの同定を目指したネットワーク解析(NEDOプロジェクト)などをています。

共同研究をしている実験グループや、研究所内のウェット系のプロジェクトの先生から、データをいただきお話をうかがいするたびに、バイオインフォマティクスに対して期待を寄せられていることをうれしく思うとともに、現実の系の複雑さに圧倒されて、お力になれることが少なさも痛感しています。ともすれば、自己目的化してしまったような手法の開発ですが、具体的なシステムを常に考えることでそれに陥ることなく、自分の立ち位置を確認しながら、研究を進めていける研究室ではないかと私は感じています。



学会からのお知らせ

・年会開催のお知らせ

2008年日本バイオインフォマティクス学会年会(JSBi2008)を次の通り開催します。会員の皆様のご参加を心よりお待ち申し上げております。

日 時 : 2008年12月15日(月)~16日(火)

場 所 : 千里ライフサイエンスセンタービル (大阪府豊中市新千里東町1-4-2) <http://www.senrlc.co.jp/access/index.html>
その他詳細は、随時ホームページ <http://jsbi2008.ist.osaka-u.ac.jp/> に掲載いたします。

年会長 松田 秀雄 (大阪大学)	プログラム委員会(順不同、敬称略)
組織委員会(順不同、敬称略)	
秋山 泰 (東京工業大学)	中井 謙太 (東京大学)
浅井 潔 (東京大学)	大川 剛直 (神戸大学)
後藤 修 (京都大学)	坂田 恒昭 (大阪大学)
金谷 重彦 (奈良先端科学技術大学院大学)	竹中 要一 (大阪大学)
金久 實 (京都大学)	
宮野 悟 (東京大学)	
水口 賢司 (医薬基盤研究所)	
	松田 秀雄 (大阪大学)
	五斗 進 (京都大学)
	黒川 頴 (東京工業大学)
	馬見塚 拓 (京都大学)
	奥野 恭史 (京都大学)
	榎原 康文 (慶應義塾大学)
	白井 剛 (長浜バイオ大学)
	遠里 由佳子 (立命館大学)

学会の現況

・有効会員数（平成20年10月15日現在） 正会員:470名（学生会員59名を含む） 賛助会員:26社

賛助会員一覧(平成20年10月15日現在)

日本SGI株式会社	中外製薬株式会社
田辺製薬株式会社	科学技術振興機構
大日本住友製薬株式会社	株式会社インテックシステム研究所
タカラバイオ株式会社	インフォコム株式会社
塩野義製薬株式会社	株式会社情報数理研究所
株式会社富士通九州システムエンジニアリング	株式会社菱化システム
武田薬品工業株式会社	サイバネットシステム株式会社
第一三共株式会社	社団法人バイオ産業情報化コンソーシアム
エーザイ株式会社	アステラス製薬株式会社
大鵬薬品工業株式会社	株式会社ナベインター・ナショナル
株式会社日立製作所	株式会社数理システム
日本新薬株式会社	株式会社ファルマデザイン
三井情報開発株式会社	有限会社パスウェイソリューションズ

日本バイオインフォマティクス学会平成20年度役員一覧

会長	後藤 修	(京都大学大学院情報学研究科)				
副会長	松田 秀雄	(大阪大学大学院情報科学研究科)				
会計監査	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総合学術院)		
幹事	秋山 泰	(東京工業大学大学院情報理工学研究科)	中井 謙太	(東京大学医科学研究所)		
	有田 正規	(東京大学大学院新領域創成科学研究科)	平川 美夏	(京都大学化学研究所)		
	遠藤 俊徳	(北海道大学大学院情報科学研究科)	松田 秀雄	(大阪大学大学院情報科学研究科)		
	渋谷 哲朗	(東京大学医科学研究所)	宮野 悟	(東京大学医科学研究所)		
	白井 剛	(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部)	本野 千恵	(産業技術総合研究所生命情報工学研究センター)		
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	浅井 潔	(東京大学大学院新領域創成科学研究科)	秋山 泰	(東京工業大学大学院情報理工学研究科)		
	金井 理	(株式会社ファルマデザイン)	有田 正規	(東京大学大学院新領域創成科学研究科)		
	久原 哲	(九州大学大学院農学研究院)	江口 至洋	(株式会社ジーエヌアイ)		
	小池 麻子	(株式会社日立製作所)	金久 實	(京都大学化学研究所)		
	後藤 修	(京都大学大学院情報学研究科)	木下 賢吾	(東京大学医科学研究所)		
	深海 薫	(理化学研究所バイオリソースセンター)	榎原 康文	(慶應義塾大学理工学部)		
	坊農 秀雅	(ライフサイエンス統合データベースセンター)	白井 剛	(長浜バイオ大学バイオサイエンス学部)		
	松田 秀雄	(大阪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)		
	水口 賢司	(独立行政法人医薬基盤研究所)	本野 千恵	(産業技術総合研究所生命情報工学研究センター)		
	水島 洋	(東京医科歯科大学情報医科学センター)	矢田 哲士	(京都大学大学院情報学研究科)		

疾患・代謝関連パスウェイ解析ツール

MetaCore

専門家が文献を精読することによって得られたタンパク質/薬剤/遺伝子間相互作用情報を収録したパスウェイツールです。オミックス解析、バイオマーカー/薬剤ターゲット探索に最適です。

お問い合わせ先
インフォコム株式会社
〒150-0001 東京都渋谷区神宮前2-34-1
TEL: 03-6868-3860 URL: <http://www.infocom.co.jp/bio/>

次世代シーケンサー向けシステム Takeru for Sequencer発売中

膨大なデータを解析する
バイオインフォマティクス研究を推進



NABE³ International
株式会社 ナベ インターナショナル

〒305-0051 茨城県つくば市二の宮1-11-9 TOSビルIII
Tel: 029-860-2377 Fax: 029-860-2378
ウェブサイト: <http://www.nabe-intl.co.jp/>

JSBi

編 集 後 記

ニュースレター17号をお届けします。今回はペタコンこと peta flops 計算機を特集してみました(執筆者のお一人から指摘があり、これが量子計算機1024 flopsだとyotta, yottaだそうです。面白いですね)。また、研究室リレー紹介もしきり直してみました。いかがだったでしょうか?年会前に皆さんのお手元に届いていることを祈りつつ。

(白井)

本年度のニュースレター担当幹事は、長浜バイオ大学の白井剛先生にお願いしています。早速力のこもった特集を組んでいただきました。次回も楽しみです。

今年の年会は学会創設以来初めて東京の地を離れ、大阪千里での開催です。当初は、投稿件数が懸念されていましたが、おかげさまで最終的には昨年に劣らぬ投稿数となりました。どうもありがとうございました。

(鈴木)

JAPANESE SOCIETY FOR BIOINFORMATICS