

「生命をはかる」研究会 国際動向レポート 第1回

八尾 徹

目次

1. HPCと生命シミュレーション
2. Image Informatics
3. オープンサイエンス

1. HPC(High Performance Computing)と生命シミュレーション

ーIBM Blue Gene によるタンパク質、ネットワーク解析ー

今月9月13日～15日に3連休を利用したIBMライフサイエンスサミット(合宿)に招待され、衝撃的なニュースと挑戦的な応用開発の話をお聞きしたので、ご紹介いたします。

(ハードの進歩)

IBMのスーパーコンピュータが Blue Gene/L によって世界トップに立ったことは(478TF 達成)皆様すでにご存知と思いますが、IBM Watson 研究所では、次の機種 Blue Gene/P 256racks がすでに搬入され、近く稼働する予定であり、それは 3.56 Peta Flops の能力が出るはずのことです。(1CPU-13.6GF, 8MB, 4,096 CPU/rack。因みに、Blue Gene/L は、1CPU-2.8GF, 4MB, 2048CPU/rack)
Blue Gene/P については、IBM J. R&D 52, p.199-220, March 2008

更に驚くべきことは、現在明らかにされていない Blue Gene/Q が2010年頃100PFを達成する見込みとのこと。

(応用開発)

以上のようなコンピュータシステムの開発だけでなく、IBM自身がその応用開発に力を入れていることに、注目したいと思います。

Almaden 研 Computational Biology の Jed Pitera 博士から(内外16人)、

- 1) 膜タンパク質 GPCR のシミュレーションを GSK社と共同でやっていること、
 - 2) インシリコ創薬を目指すコンピュータスクリーニングのために既存の10種のドッキングソフトをすべて評価した上、精密な自由エネルギー計算を実施していること
- など、いずれもこれまでできなかったレベルの計算を Blue Gene を使って進めていることが紹介されました。

Watson 研 Systems Biology の Gus Stolovitzky 博士からは(内外12人)

- 1) 新世代シーケンサー(Nanopore)とその応用の開発
- 2) 心臓のマルチスケールモデリング法開発
- 3) ガンの細胞パスウェイのモデリング
- 4) バイオパスウェイのリバースエンジニアリング DREAMプロジェクト

に外部と共同で取り掛かっており、具体例として DNA 損傷に対するP53分子の振動応答解析他が紹介されました。

他にもグローバルなチャンネルを利用した共同研究が目立ちました。

2. イメージバイオインフォマティクス

2008 月 7 月にトロントで開かれたISMB (Intelligent Systems for Molecular Biology)の学会の招待講演で、Eugene(Gene) Myers 博士が "Image Bioinformatics" の重要性を強調しました。彼は、数学・物理の出身ですが、ゲノムの世界では大きな貢献をしてきました。1990 年にホモロジーサーチ法 "BLAST" の開発をし、2000 年頃には Whole Genome Shotgun 法を開発しました (PNAS 2004)。その後 Celera 社をやめて Berkeley に移ってからこの分野に転進したようです。

近年のゲノムワイドな実験と測定技術の進歩で (RNAi, GFP, MS 他)、画像情報の取り扱いが、非常に重要になってきたとして、細胞内、細胞間、細胞行動などを対象に、既存の多様な画像情報を網羅的に調査した上、問題点の抽出・課題の設定・方法論やシステムの開発を精力的に進めています。

すでに、線虫の細胞分裂過程、Worm Atlas, Fly Brain Atlas, Whole Mouse Brain Image, 3D PCAM など先駆的な仕事を調べつくした上、線虫の遺伝子ノックダウン、RNAi などによる細胞分裂の様子を、Worm Atlas を発展させて 3D Atlas を作っています。1 秒間に 500 フレームを取っているようです。

Fly Brain のデジタル Atlas も作って、10 万ニューロンを扱い、2 万ニューロンが大切であることを確かめたといっています。3D Alignment and Annotation of Fly Brain を進めている。形態学的なモデルと実測が合うかどうか調べています。

マウスについては、Stochastic Mouse Brain Atlas で、発現解析とネットワーク接続の関係を調べています。Hagmann の PLoS Biology 6 e159,2008 Allen Atlas についても調べており、Mouse Brain のイメージづくりでは、50 μm レベルで 2500Tube を測るので、測定に 6 ヶ月かかるとのこと。

Brain あたり 5 千万のデータになると言っていました。

彼の精力的なアプローチに感心すると同時に、この分野が新しいバイオインフォマティクスであることを実感しました。

因みに、バイオインフォマティクスを細分すると、ゲノムインフォマティクス、アレイインフォマティクス、プロテインインフォマティクス、メディカルバイオインフォマティクスなど多様であり、それぞれに基本的数学や方法論にかなりの違いがあります。

ゲノムシーケンシングデータとイメージデータは共に今後急増することが間違いなく、これらを組み合わせた Genotype to Phenotype 解析あるいはオミックス解析は、ますます「計測」「数理解析」力の競争の場になるでしょう。

3. オープンサイエンス・オープンナレーション

今後の科学研究にオープンサイエンスの行き方が大きな影響を与えるとの認識は年々急速に高まってきました。

最近の次世代シーケンサーやイメージング技術の進歩を考えれば、今後ますます膨大なデータが産出されることは間違いなく、それらのデータの解釈は、データ測定者・グループのみでは不可能になってくるでしょう。

(上記の記述と矛盾するようですが、これも現実です。)

現に、C.Venter 博士らによる Gloval Ocean Sampling によるメタゲノムデータについても発表当初(2006 年)から、データを完全公開して世

界中の研究者からアノテーションしてもらおうという行き方をとりました。

このような傾向は、単にデータのアノテーションのみでなく、科学的発見・知見の早期公開・共有にもつながるでしょう。

最近の動きを3つご紹介します。

1)2008年6月にサンジェゴにおいて2日間の会が開かれました。

e-Science, Wiki, Blog, Webcast, Videoなどをどう利用して科学の研究や流通を促進していくかについて話し合いが行われました。

この会の組織委員長であるUCSDのJohn Wooley教授から8月訪問の際、この会の内容の速報はNature Proceedingに出ていること、現在報告書・提案書を草稿中であること、また現実には、大腸菌研究分野では顕著な進展をしていること(EcoliHub)等を伺いました。

会議の内容は下記から見ることができます。

<http://workshop.wik.is> → Video Archives

2)2008年7月にトロントのISMB学会で面談したChris Sander博士(Director, Bioinformatics Center, MSKCC, NYC)も開口一番、今後オープンサイエンスが重要になっていくことから、学会としてもどう対処あるいは変革していくかについて、Phil Bome(前会長)等と話し合ってきたところだと興奮気味に話してくれました。

研究・発表・出版・教育・広報などあらゆる面で、インターネット・ビデオを利用した方式が変わっていく、変えて行くことを考慮すべきである。それによって科学的なCultureを広く一般にも広め(現在の5倍位)それが今後のグローバルな問題解

決(環境・エネルギー・食糧・健康など)につながり、人類の幸福に貢献するというビジョンを持っている。

このことに具体的にどう貢献して行けるかを討議している。多くの人への科学教育・そのための手段(出版、教材、HyperLink、ビデオ、アノテーションなど)、資金サポートなどを短期・中期・長期に亘って考えていく必要がある。上記1)と全く同じ方向です。

3)2008年9月3日号のNature誌は、"Big Data"特集として、Petabyte時代の諸問題を述べています。その巻頭言(p.1)は、"Community Cleverness Required"です。今後の研究は世界中の膨大なデータと知識を組み合わせることで更に上位の知識を獲得していくことになり、そのためにはデータや研究の公開性が重要であるといっています。

具体的に、Wikiomicsの欄(p.22-25)で、すでに遺伝子・タンパク質・パスウェイなど約10種類のデータベースのアノテーションについてWikiスタイルの公開共同研究化が進んでいることが紹介されています。

このような行き方は、いろいろな問題(優先権・著作権・知的所有権・個人成績・動機付け・機密保持・プライバシー他)をはらみつつも大きな方向として進んで行くように思います。

皆様はいかがお考えでしょうか？

2008年9月 八尾 徹