

## CBI 学会関係者へのメッセージ

はじめに

私は、1981年の3月に、現在のCBI学会の母体となった組織を立ち上げました。それから30年となる2010年に、これまで関与してきたこの会に関わる仕事の多くを、後継の方々にお渡しし、2011年からは、サイバー絆研究所(ICA)を主な仕事の拠点とすることにしました。もちろんCBI学会とのご縁もありますが、どちらかと言えば、サイバー絆研究所(ICA)の視点からCBI学会に協力させていただけたら、と考えています。以下、このことに関して簡単にご説明させていただきます。

以下は、CBI学会の1981年の3月の設立発起人会に提出された設立趣意書の主要な部分です。

「・・・今日、化学と生物工業の急速な成長に伴い、化学物質と合成微生物が環境、生物及び人間生活に及ぼす影響は増大の一途を辿っており、さらにそれらに関する情報と知識もまた爆発的に拡大している。しかも、人類はまだこのような歴史的状況の序章に位置しているに過ぎない。而して、人間生活に有用な新しい化学物質や微生物を効率的に探索し生産する技術、及びそれらの生産物が人類に真の恩恵をもたらすように、安全かつ効率的に利用するための技術に関する研究開発は焦眉の課題となっている。

このような研究開発は、分子から生物圏に到る各レベルにおける化学物質と生体系との相互作用に関する経験的・科学的知識を基盤として展開されなければならない。けれども、化学と生物学との、この境界領域は、伝統的な化学と生物学だけではなく、分子生物学、生化学、薬理学、毒性学、栄養学、医学、農学、環境科学等、幅広い学問分野に散在しており、統一的方法論はもとより互いの知識利用の便宜をも欠いているのが現状である。

我々は上記の課題に効果的に接近する手段としては、これも今世紀後半において発達の著しい電子計算機に代表される情報技術の成果を駆使する以外にないと考える。よってここに、上記の化学と生物学の境界領域への計算機と情報学の応用に関する研究会を発足させ、広く関心のある学術同好の士間の知識の交換と研究の交流を計り、もって科学技術の社会への有効利用に貢献せんとするものである。・・・」

その後の30年の活動では、主たる話題が次第に、医薬品の研究開発を目標にした情報計算技法に収斂していきました。現在、CBI学会の2011年以後の体制作りの中で、これからの学会の発展のために何をなすべきかが議論されていますが、最初の設立趣意書では言及されながら、現状では依然として展開し難い課題として残されているように思われます。その中に、サイバー絆研究所(ICA)と関連している課題がいくつかあります。以下では、そのいくつかを紹介します。

自然科学と情報学

CBI 学会は、正式名称、情報計算法学生物学会が示すように、情報学や計算技法と、化学、生物学を基盤としています。その中で、私自身は、情報学を専門と考えてきた人間です。計算技法との関連で情報学が産声を上げたのは、1960 年代です。私はその最初の世代に属しますが、最初は一般的なパターン認識の問題、次が医学における診断や治療の問題、さらに医学における多様なデータ解析とシステム作り、などに関わってきました。さらにその後、化学と生物学に関わる情報計算法学に出会うことになりました。そうした私の経験は、情報学 Informatics や計算技法 Computing が、さまざまな科学や技術の領域の中に浸透してきた歴史の一部のように思われます。

情報計算法学の応用分野の拡大		
	数学・計算	情報学 / Meta Science
物理学	計算物理学	情報物理学?
化学	計算化学 Computational Chem.	情報化学 / 化学情報学 Chem(o)informatics
生物学 Biotech	計算生物学 Computational Biology	生命情報工学 Bioinformatics
薬学 毒性学	計算毒性学 Computational Toxicology	医薬情報学 Pharmacoinformatics Toxicoinformatics
医学・医療	数理遺伝学 放射線の照射計算	医療情報学 Medicalinformatics
環境科学		環境情報学 Environmental information
経済・金融	確率（過程）論 (Fischer)Black-(Myron)Scholes 式	数理ファイナンス 経済物理学（大規模ネットワーク）

いまや「何々情報学」という学問分野は、随分増えてきています。ところが、情報学がどんな学問であるかについては、あまりはっきりしない状況にあります。とくに興味深いのは、Chemical Informatics、Bioinformatics という言葉がありながら、Physical Informatics という言葉がないことです（少なくとも私の知る限り）。例えば、情報物理学という言葉は確かにありますが、それは例えば統計力学の計算技法を、物理学以外の対象に適応する、というような試みです。これは明らかに Chemical Informatics、Bioinformatics とは違った使われ方です。

私は、たまたま 20 代の後半から、物理学と情報学（パターン認識）という 2 つの分野に関わってきましたから、情報学のその後の発展の中で、物理学と情報学との関わりが気になっていました。その物理学の中で、最近、情報学への接近が目立つようになってきました。具体的には、量子情報、量子計算という分野の台頭です。それらの領域の基礎になるのは、

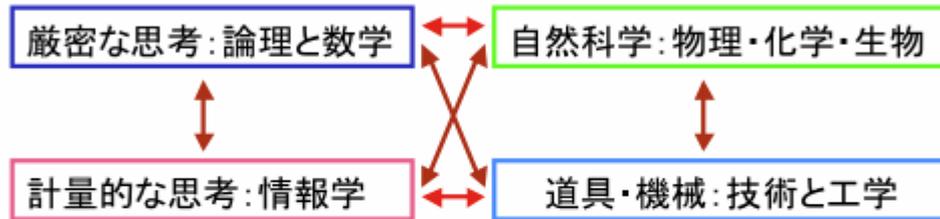
「量子纏れ Quantum Entanglement」という概念（現象）です。それは実は、量子統計力学の基礎になる多粒子系の量子力学 Many-Body Problem なのですから、量子化学の基礎にもなっています。

それだけでなく、この概念を記述する数学は、パターン認識の基礎理論とほぼ同じです。そのようなわけで、私が履いていた2足の草鞋が実は、お互いに深く関係していたこと、さらに、その共通性が最近注目されている量子情報、量子計算の理論的な基礎ともつながっているという、不思議な巡り合わせに気がつきました。ただ、こうした面白い縁は、ほとんど語られることはありません。私が2足の草鞋を履くようになったのは、私が助手をしていた渡辺慧先生が、そういう問題を出したからです。その渡辺先生は、「学は一なり」と言われていました。私の仕事に関する限り、そのことは本当だったわけです。

いずれにしても情報学とは、どんな学問かという疑問を追求していくことが、私の関心事でした。結局、私が到達したのは、「**情報学とは計量的な思考の方法論**」だという結論でした。このことは、Chemical Informatics、Bioinformaticsにも共通することですが、同じような方法論、例えば統計学やパターン認識、Data Mining、画像解析などの技法は、物理学でも使われています。ただ、彼らはそれを「物理情報学」とは呼んでいないだけです。したがって、科学それ自身とは違いますが、科学に関係した学問として、情報学は自然科学の研究者の計量的な思考技法だということが出来ます。さらにそれらは、経済学や社会学、心理学、文学、芸術論などでも使われている技法なわけです。

つまり、CBI学会の関心領域である情報計算技法をCBI学会の中だけに閉じ込めておくのは、如何にも窮屈だと思われれます。もっと他の自然科学や他の学問領域における情報学の技法の専門家との間に交流があった方が、学問の進歩のためにはよいのではないかと私は考えています。

## 思惟の方法と自然科学



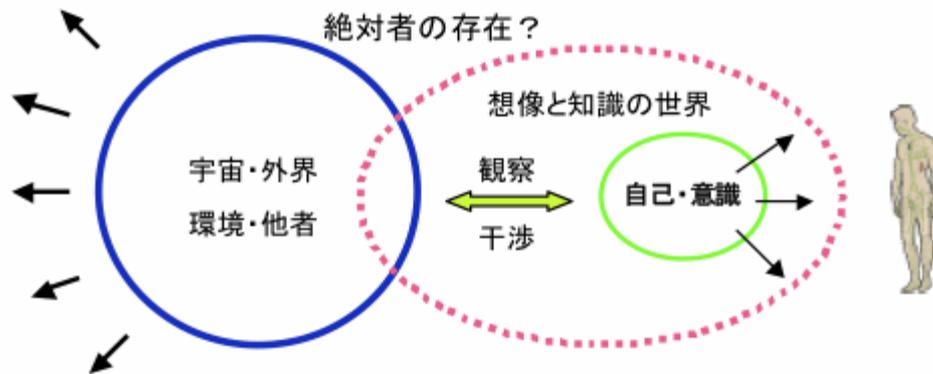
情報学とは思考学(思惟の方法)である

数学と科学技術は最も厳密かつ創造的な思考の場

ここでもうひとつ重要なことがあります。CBI 学会は、Bioinformatics を関心領域の一つとしています。Bioinformatics がどんな学問かについても、議論があるようですが、私は簡単に「分子生物学における情報計算技法」だと定義しています。この定義は、「情報学とは計量的な思考の方法論」という考え方から導かれる当然の帰結ですが、さまざまな情報学の中で、Bioinformatics だけは、そうした応用技法的な視点を越えた課題があると、私は考えています。それは生命や知性に関わる問題です。

## 人間の自然認識

- ロックのかかる2本足で直立、歩行する
- 脳が大きい
- 脳が未熟なまま生まれ、誕生後に成長する
- 言語が使える
- 社会的な集団をつくる



現代の科学は、物理学、化学、生物学というように階層になっていると考えられています。世の中の現象を還元していけば、物理学に到達するという、物理学帝国主義という考えは、20世紀に確固となりました。生命が物質的な存在であることは、疑いのないところですが、意識、精神、知性となると、物理学の概念だけに収まりそうもありません。これが「もの」と「こと」とを区分する考え方です。物理学でも、数学に倣って、公理的な記述が試みられることはあります。例えば、Axiomatic Quantum Theoryなどがそれです。しかし私には、現代の物理学が、そして自然科学が、それだけで閉じているとは、到底思われません。つまり自然の認識や記述には、情報学の概念が必要だと思われまます。Bioinformaticsは、究極的には、そのような学問領域に発展していくのではないかと、私は予想しています。この意味で、Bioinformaticsは、他の「何々インフォマティクス」とは違って、(自然)科学としての素質を秘めている学問領域であると考えています。

このように考えれば、Chem-Bio Informatics (CBI) という学問領域も、応用の技法だけではなく、自然科学そのものの一部として、より深く、広く発展していきたくと予想されます。そうであれば、CBI学会の次の世代の研究者たちには、現在のCBIだけでなく、未来のCBIについても考えてもらいたいと思います。

ただし、上のような話は、短期間に成果を上げることが求められる、今日の競争的な研究資金による研究にはあまり馴染みません。ですから、自然科学系の大学院レベルの教養科目

のような位置づけで、いろいろな分野の専門家に育ってゆくであろう若い方々の眼に触れるような講座にできればよいのではないかと考えました。また、そのような少しのんびりした話は、サイバー絆研究所(ICA)の方が、ふさわしく、また取り組みやすいとも考えました。

具体的には、大学院レベルの学生を対象として、物理学と情報学の関係、Chemical Informatics と Chemical Computing、Bioinformatics と Biological Computing などの解説を含む、自然科学と情報学に関する入門講義を、インターネット上に置くことを計画しています。これらの講義の目的は、教育ですが、CBI 学会の方々も、こうした講座には、ぜひ興味をもっていただけたらと願っています。

### 薬と毒の科学の融合

先に述べた CBI 学会の 1981 年の設立趣意書には、

「・・・人間生活に有用な新しい化学物質や微生物を効率的に探索し生産する技術、及びそれらの生産物が人類に真の恩恵をもたらすように、安全かつ効率的に利用するための技術に関する研究開発・・・」

という文章があります。ここには、医薬品のような有用物質を探索することと、それらを安全に管理し、使うということが述べられています。そもそも CBI 学会は、私が化学物質安全性(毒性)問題に関する科学技術庁の委託研究を任されたことが契機となって設立されたのです。

したがって当初は、医薬品の研究開発 Drug Discovery と同じように、毒性研究を取り上げる予定でしたが、実際そのような話題が取り上げられたことは、数えるほどしかありませんでした。このことは、私にとっては、心残りでした。なぜなら、私は、その後、化学物質安全性に関わる国立医薬品食品衛生研究所の化学物質情報部の責任者にもなったからです。この時、計算毒性学の研究グループを立ち上げる必要性を痛感しましたが、結局、この願いは実現できませんでした。化学物質安全性の問題は、貿易問題もあって、国際的な合意形成 Harmonization が不可避な分野です。そこではすでに計算機による予測法が重要な役割を果たしていると聞いていますが、我が国には、そうした話し合いに参加できる専門家がないような状況になっています。

医薬品開発においても、有害作用(副作用)の確認は、重要な関所になっています。こうした問題は、いわゆる ADME/Tox と呼ばれていますが、化学物質の安全性の問題とは、表裏の関係にあり、方法論的にも深い関係にあります。とくに分子生物学やゲノム医学が急速に進歩した最近では、両者の間の方法論的な違いは、ほとんどなくなっています。さらに、最近毒性学では、毒と薬の違い、薬効と毒性の違いを決定するのは量であることを意味する、Hromesis という考え方の正しさを証明する実験例が増えてきています。この可能性は、内分泌かく乱物質の脅威が語られた時にも、示唆されていました。とくに線虫を用いた研究は、注目に値します(三輪錠司、長谷川浩一、毒即是薬 薬即是毒—ホルメテイティック回路による生体防御、遺伝、65(1): 98-104, 2011.)

おそらく薬効と毒性に関わる科学は、これからますます融合し、そこに健康食品などを開発する新しい方法論が生まれてくると思われます。残念ながら、こうした問題は、CBI学会では、まだあまり議論することができません。これもサイバー絆研究所(ICA)で取り上げたい課題です。

予防と健康の実践を支援する仕組み作り

CBI学会は、疾病の理解や医薬品の研究開発を最終的な目標の一つにしています。これに対して、サイバー絆研究所(ICA)は、食事、健康食品、サプリメント、生活習慣の工夫、運動など、(薬事法上の)薬を使わない対処法(Non-Drug Intervention、NDI)による予防や健康維持に関わる研究開発に関する情報交換を、重要な事業の一つと考えています。

この事業には、

1. 健康計量学 Healthmetric(s) 研究会の立ち上げ
2. 予防健康実践情報協会の立ち上げ
3. バイオ・農業・健康産業による地域活性化に関わる活動

などが含まれています。

CBI学会が対象にする薬は、病気になった人を治すという、医療サービスの中に位置づけられています。医療用医薬品は医師によって処方されます。また、大衆薬(OTC薬)の購入には、薬剤師が立ち会います。しかし薬を使わない対処法は、個人、個人の判断と責任で選択されます。それが適切あるいは適正になされるためには、使用者が予防や健康について、正しい知識があり、食事、健康食品、サプリメント、生活習慣の工夫、運動の効用と危険性について理解していることが前提となるはずですが、しかしながら、現在、一般の市民がそのような情報や知識を得られる仕組みがあるかと言えば、大いに疑問です。

インターネットで学ぶ環境作りをめざしているサイバー絆研究所(ICA)は、このような課題に取り組むことを目標の一つに掲げています。この意味で、専門家を顧客とするCBI学会と、一般市民をも顧客と考えるサイバー絆研究所(ICA)は、使命を異にしています。しかし、科学的な方法論から見れば、両者には共通のところが多くあります。例えば、食事の効用については、Nutri-genomicsやNutri-epigeneticsのような研究が大いに注目されています。食物の効用と、環境汚染物質のヒトへの影響は、ともに化学物質の生体への影響と言ってよいでしょう。ですからCBI学会の設立趣意書からすれば、こうした課題もCBI学会の関心領域に含めることができます。

だが実際にそうすることは、現在のCBI学会にとっては、違和感が大き過ぎると思われま。この意味で、2つの会の関係は、極めて相補的ではないかと私は考えています。

その他の研究集会

サイバー絆研究所(ICA)では、CBI学会と同じように、研究集会を定期的を開催することを考えていますが、これには、CBI学会と同じような、専門家を対象とする研究集会(講演会)だけでなく、Outreachと呼ばれる市民への知識の啓蒙や普及をめざした集会も予定されています。上で挙げた、予防や健康に関わる市民向けの学習のための集会は、その一つの例です。

私はよくCBI学会は、参戦者が限られたF1レースのようなものだと考えていました。実際、理論的な医薬品の研究開発に参加できる研究者はそう多くはありません。それに対して、サイバー絆研究所(ICA)は、大衆車の利用者の同好会の様な性格をも備えています。したがって、その潜在的な会員は、格段に多いと考えています。

### CBI学会との共同事業

上で述べた事業は、CBI学会とは相補的な事業でしたが、CBI学会との共同事業に位置づけるべき活動もあります。その一つは、私がThe CBI Work Plazaと呼んでいる、CBI Grand ChallengeのPlatform作りの仕事です。この仕事は、もともと私が広島大学(相田美砂子教授の研究室)から申請して認められた科研費(2006-7年)による、「計算創薬のアカデミアへの開放」をめざした環境作りの小さなプロジェクトで作成した教程と、東京医科歯科大学の(田中博教授の研究室)JSTの人材養成プログラム(2006-2009年)で私が担当した講義のために作成した教材と資料を踏み台として計画されています。

それらのコンテンツの一部は、CBI学会の管理下にあるネットワークに接続されたマシン(サーバー)上に置かれています。その理由は、それらのコンテンツをCBI学会の環境下でさらに発展させることができれば、CBI学会の戦略的な資源に成長させていけると考えてきたからです。このプロジェクトの最初の目標は、大学院レベルの教育ですから、私が活動の拠点をサイバー絆研究所(ICA)に移したとすれば、この事業をCBI学会とサイバー絆研究所(ICA)の共同事業とするのが、一番自然だと考えています。

このプロジェクトと関連があるのは、製薬企業の新しいR&Dモデルといえる、CBI Allianceプロジェクトです。ごく簡単に言えば、このプロジェクトは、CBI Work Plazaに治験に関わる臨床研究を追加したものです。

もちろん、組織間の共同事業となれば、どのように進めるかを、個人ではなく、組織間で話し合い、合意を形成しておく必要があることは言うまでもありません。

### おわりに：学問の価値

研究者を動機づけるのは、報酬ということももちろんあるでしょうが、それ以上に好奇心と名誉ではないでしょうか。後者に関しては、世俗的な価値が高いほど有利かもしれません。この視点から見れば、情報学が役に立つことは理解されても、研究や学問的には、評価されないことが多いと感じられます。とくに、化学、生物学、医学、薬作りというようなウエツ

ト（あるいは Bench）や臨床の研究者から見れば、「自分たちの役に立ってくればよい、学問的な価値はどうでもよい」ということになるでしょう。

かつて CBI 学会の講演会に呼んだある海外の研究者は、化学への計算機の応用に関する講演の中で、「これは私の趣味 Hobby です」と言っていたのを聞いたことがありました。もちろん、生物学の実験を「趣味」としてやっていた、Richard Feynman や Murray Gell-Mann のような超一流の理論物理学者もいます。どちらを本業、どちらを趣味でやるかは、研究者の好奇心と価値観、さらには仕事の機会の問題ですが、我が国の生物医学系の研究機関では、情報計算技法の専門家のための正規の職が少ないように思われます。その上、そうした専門家への評価も不当に低いように思われます。

私は、このことは、日本の官僚機構の伝統に関係していると考えています。その典型は、旧日本軍ですが、そこでは Intelligence（諜報、偵察）と Logistics（兵站、補給機能）への軽視、無理解が明らかです。例えば、臨床医学における統計家を含む情報計算の専門家の必要性は、繰り返し指摘されてきたことですが、いまだに、理解されているとは思えません。ある人は、これは戦後日本を支配した GHQ が、国家管理の重要な道具である、統計学を大学で教えることを禁じたことと関係しているのではないかと、言っていました。真偽のほどはわかりません。いずれにせよ、情報計算の専門家は、助っ人や非正規雇用者として、働いている例が多いように思われます。

こうした状況は、情報学の教育が体系をなしていないことにも関係しているように思われます。我が国が科学・技術立国をめざすなら、このような風土を改めていくことが必要だと考えますが、CBI 学会ではあまりに局地戦になってしまいます。この問題は、サイバー絆研究所(ICA) で、取り組みたいと考えています。

2011年2月 神沼二真