

ICA-23年7月の研究講演会

日時：7月18日（火）13:30-15:30。

演題：調査研究としての、『量子、ビット、ゲノム研究』を、どう捉えているか？

開催趣旨：この3年間、COVID-19の影響もあって、ICAの活動は内部的なものに留まっていた。しかし、その間の社会の変化は激しく、有意義な活動をするためには、過去の活動に捉われない、まったく新しい発想が必要になっている。そこで本年度は、これまでの活動の継続的再開ではなく、近未来の社会的な状況を視野に入れた、全く新しい構想を基に、展開しなければならないと考えた。その核になるのが「『量子、ビット、ゲノム』という、3つの領域が融合する先端的な領域を我々の新しい関心領域（Areas of Interest）とする」、という発想である。この研究講演会では、この発想の概略を提示し、ICAの会員や関係者のご意見をいただくことを目的としている。

プログラム 13:30-15:30

13:30-14:00 パンデミック期、2020年～2022年度、の活動

COVID-19に関する文献収集と分析作業と今後の関り

14:00-14:30 本年度（23年度）の活動：全員参加の「情報と意見の交換会」の開催

ネットを基盤にした交流活動（**Cyber Nexus**）の実験

14:30-15:00 作業仮設としての「量子、ビット、ゲノム」調査研究

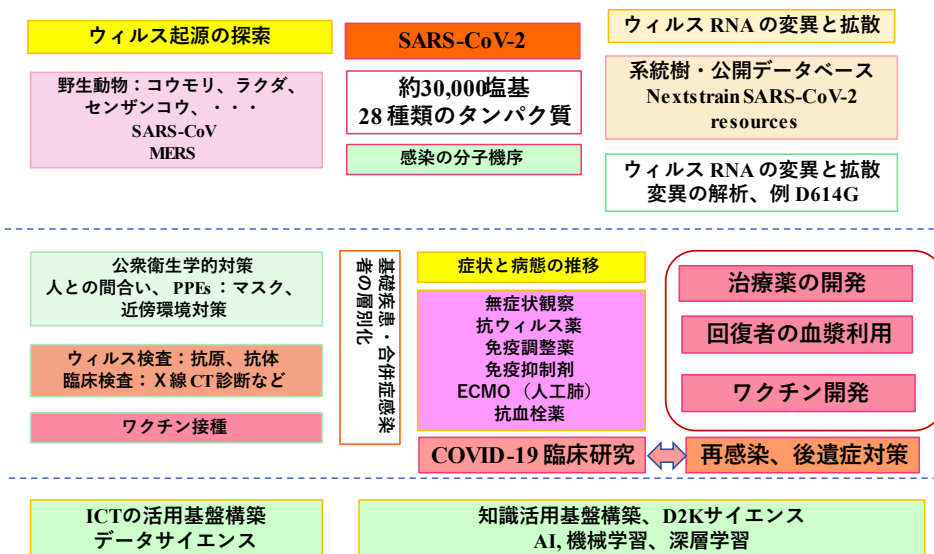
クラブキュービッグ(**Club QBiG**)構想

15:00-15:30 休憩後、質疑と討議

I. パンデミック期、2020年～2022年度、の活動

COVID-19に関する文献収集と分析作業と今後の関り

- (1) 医療や科学研究についての、国際的な関連文献を無償で使えるような非常措置がとられた。この結果、いわゆる国際的に権威のあると言われる論文誌の COVID-19 関連文献を無料で入手、活用できた (?)
- (2) 神沼は、大型の iPad (iPad Pro) に一日平均、20~20 報、ダウンロードしていた (とくに 2020 年度)。



図の説明： SARS-CoV-2/COVID-19 パンデミックに関わる課題の区分。このパンデミックに関わる課題は、

- (1) 病原ウイルスの起源と、その宿主や地域的な拡散と進化、
- (2) 感染の予防対策と、感染後の医療機関における対処、それに関わる、検査、治療薬、ワクチン開発、
- (3) それらの対策や研究のための D2K サイエンスと、それらすべての基盤になる ICT、という 3 層の構造をしている。医学としては、分子臨床疫学と呼べるような新しい領域が形成されていると考えられる。

まとめ：この作業は、新型コロナウイルス疾患対策から次世代ヘルスケアへ〜カギとなる分子臨床疫学と D2K サイエンス〜、(株) エーイー企画の広告誌、創薬のひろば、Vol.13, 2020 年、秋号、4~13 頁に簡単にまとめている。

提言：教材としてまとめる意義があるのではないか。情報計算の視点からは、単なるシミュレーションではなく、(最適)制御理論 Control Theory の視点に立つことが重要。

II. 本年度（23年度）の活動予定について

- ・ 全員参加の「情報と意見の交換会」の開催
- ・ ネットを基盤にした交流活動（Cyber Nexus）の実験

現状認識

- ・ インターネットの普及で、全国紙や広域テレビ放送のようなマスメディアの影響力が低下している。
- ・ 数人のそれぞれの分野で人気のある、タレント的な情報発信者によるネット配信活動（マイクロメディア）が影響力を増しているが、不安定。
- ・ 上記の2つの間に、ミドルメディアとでも呼ぶような、関心領域を限定的にした情報交換と情報発信事業、すなわち「ミドルメディア」が存在しうるのではないか？
- ・ その役割のひとつは、自然（中央公論社）、科学（岩波）、科学朝日（朝日新聞）、日経バイオテック（日経?）などが担った、科学や研究開発をカバーした良質の教養的な定期刊行物の衰退を補うことである。
- ・ もうひとつの役割は、ICAがめざす、退職あるいは準退職世代の若手世代との「現職世代を飛び越した」交流の推進である。

本年度の活動目標

- （1） 会員あるいはそれに準じた関係者による話題提供：去る5月の会合の時に紹介いただいた現状や関心事項に関わる話題についての、質疑を入れて1時間半程度の話題提供と質疑あるいは討議。
- （2） 謝礼は用意しないが、会費を免除する（あるいは、今年度における謝礼と会費を相殺する）。
- （3） 開催は、月1度あるいは2度、あるいは、一度に複数人の話題提供をお願いする。
- （4） 発表者の同意があれば、それぞれの発表は、ネットから、ある期間、閲覧可能とする。

備考：発表者の承諾があれば、上記の活動などに関係した「コンテンツ」を、印刷物などとして、公にする可能性も検討する。

III. クラブキュービッグ(Club QBiG)構想

目標：現在の科学技術の基盤になり、かつ、社会や我々の生活の基盤になっている、量子、ビット、ゲノムという、この世界の根源に関わる3つの単位概念を基礎にして、それらの科学や技術が融合していく、次の社会を予見し、若手世代と共に学習できるネットを基盤とした環境をつくっていくことをめざす。

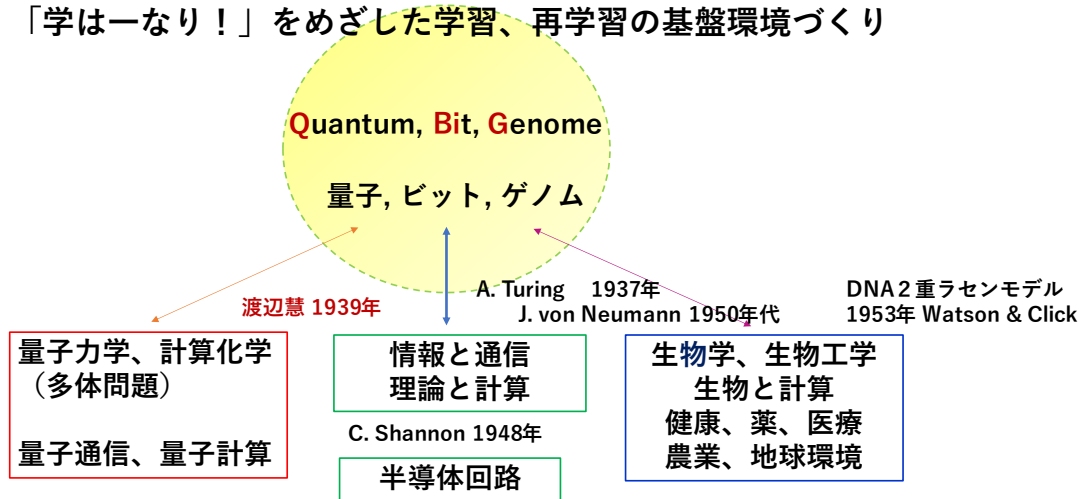
具体的には、最初にそれぞれの分野の現状を調査し、次に、それらの相互の依存関係を、個別の研究開発課題ごとに、明らかにしていくことを想定している。

これらはすべて調査研究的な活動であるが、それらの活動の成果物としては、「次世代を担う若手世代の教材あるいは補助教材を開発すること」を想定している。

.....

Club Q-BiG : クラブ・キュービッグ

「学は一なり！」をめざした学習、再学習の基盤環境づくり



.....

個別課題-1: ゲノム～ヒトゲノム解読計画完了から 20 年、これからの 20 年
神沼の日立ハイテクにおける講演資料など。

個別課題-2: 計算機の進歩、とくに高次の認知機能（人工知能、AI）研究の進展

- ・ いわゆる人工知能(Artificial Intelligence, AI)、機械学習（Machine Learning, ML）とくに深層学習（Deep Learning, DL）の進歩と、それによる医療一般や薬（医薬品）づくり(Drug Discovery)への応用の進歩。
- ・ 医薬品開発は、そうした技法の応用がとくに重要視されている課題、領域であるが、それは複合的かつ複雑な過程を辿るから、どのような側面（段階、過程のどこの部分を改善するのか、正確に区分する必要がある。下記は米国 NIH 傘下の医薬品開発を支援する研究機関 National Center for Advancing Translational Sciences (NCATS) によるバイオ医薬品開発（パイプライン）の流れ図。

.....

Biologics 4D Map： NCATSによるバイオ医薬開発のパイプラインの見直し

A. Basic science research & target identification
基礎研究から標的探索へ

B. Target Pharmacology & biomarker development
標的の薬理的解析
バイオマーカー開発

C. Lead Identification
リード物の同定

E. Clinical research & development
臨床研究開発

F. Regulatory review
承認手続き

D. Lead optimization, candidate selection, IND-enabling studies, scale-up for manufacturing
候補物の最適化、製造工程の確認

G. Postmarketing
上市後の対応

H. Medical landscape
臨床記録の分析

NCATSのサイト <https://ncats.nih.gov/translation/maps>

.....

- ・医薬品開発は、つまるところ企業に依存しているため、薬づくりを支援する AI や ML は、そこで使われる製品として期待される。
- ・ML の進歩で画期的だったのは、アミノ酸の 1 次配列からタンパク質の立体構造を推定するコンテストで、AlphaFold という DL を活用したカナダのシステムが優勝したことだった (2012 年)。

個別課題-3: 量子計算 (Quantum Computing)、量子情報 (Quantum Information) や量子通信技術の進歩

これらの新しい課題は、科学の領域であり、また技術の領域でもある。量子計算や量子情報の概念が提唱されたのは、2000 年以前に遡るが、それらの実現は、今世紀に入ってからのことである。

量子計算の実用化の視点で候補に挙がっているのは、物理学でいう多体問題(Many body problems)や、量子化学 (Quantum Chemistry) の計算問題である。その流れの中で、医薬品の開発 (Drug Discovery) が量子計算の研究課題になっている。

F. F. Flöther, The state of quantum computing applications in health and medicine, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2301.09106>

Y, Cao et al. Potential of quantum computing for drug discovery, Potential of quantum computing for drug discovery, DOI 10.1147/JRD.2018.2888987, IBM Journal of Research and Development.

神沼としては、これらの課題の文献探索が、一応できているので、話題提供したいと考えている。