

ICA ビジヨナリーセミナー「薬づくりの新しい R&D モデルを探る」

第 2 回「オープンコースによる人材育成」(2013 年 9 月 25 日) 講演資料

自然科学と情報計算技法に関するネット上のオープンコースの現状

神沼二眞 (サイバー絆研究所) kaminuma@join-ica.org

1. はじめに

私は、昨年 7 月に、CBI 学会の NPO への移行に伴う、残された任意団体としての事業の一部を引継ぎ、それまで CBI Work Plaza と呼んでいた構想を、私たちが新たに立ち上げた非営利組織であるサイバー絆研究所 (Institute for Cyber Associates, 略して ICA) の CADU (キャドゥ) Platform 事業として発展的に継承する作業を開始した。ここで CADU とは、CADDU (Computer-Aid Drug Discovery, Development, and Usage) の省略形であり、The CADU Platform は、The CADDU Platform と同じ意味に使っている。

CADU Platform の具体的な事業内容は、次の 4 つである。

- (1) CADU Platform の構築：医薬品の研究開発と適切な使用への情報計算技法の活用に関する案内サイトの構築
- (2) 「計算化学から計算創薬へ」の入門講座と実習環境の構築
- (3) 医薬品の研究開発と適切な使用のためのバイオインフォマティクスの参照サイトの構築
- (4) 上記に係わる情報交換と交流

この引継ぎは、形式的には、当時、CBI 学会の特別顧問であった神沼の、個人の責任という形で行われた。ただ、この 4 月に、個人、神沼から、ICA の定款に定められた「非営利団体の運営を支援する事業」の一つとして、ICA が関与する活動として、さらに受け継がれた。同時に、CADU 関連活動の独立性を担保するため、CADU 関連事業を実施する非営利学術任意団体として、「キャドゥアライアンス CADU Alliance」を、必要最小限の簡素な組織として設立した。

このような経緯は、当事者以外にとっては、分かり難いと思われるが、事務処理上の問題を簡単にすることが狙いであり、活動内容としては、むしろわかりやすいものになってきたと言える。以下では、この新しい枠組みの中で、キャドゥアライアンスが受け継いだ、キャドゥ・プラットフォームの事業の発展計画と、それと密接に関係する新しく立ち上げようとしているオープンコースについて、簡単に紹介したい。

2. CADU Platform 事業の発展

我々は、現在、CADU Platform 事業を、図のように、発展させたいと考えている。第1の発展方向は、我が国では研究者の少ない、計算毒性学の研究者のコミュニティを立ち上げることである。ただ、それだけに止まらず、新しく台頭してきた iPS 細胞を医薬品開発の Early Stage に活用することや、線虫やハエ、ゼブラフィッシュのような「簡便なモデル生物」を、疾患の生物学や薬効や毒性研究に活用することを連動させることを考えている。

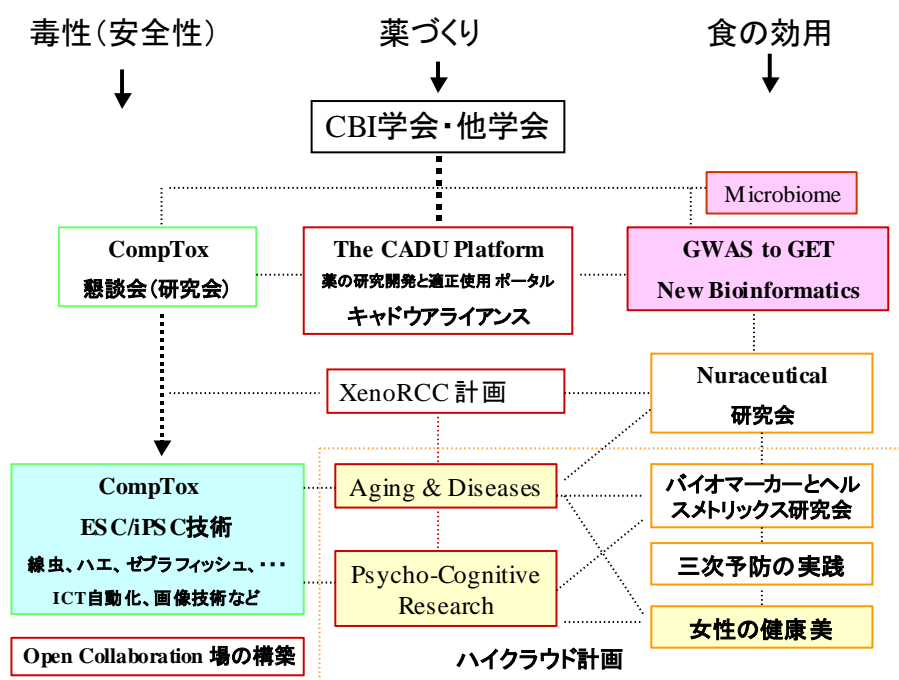


図 1. CADU Platform 構築を発展させた、将来構想

もう一つの方向は、食品に含まれている、薬と同じような、微量で効果を発揮する成分の探索とそれを発展させる研究である。具体的には、ものやエネルギーの代謝に関わる経路、寿命の経路、抗酸化の経路などに作用する食品成分のような天然物の探索と、構造活性相関、標的（生体内）分子との Docking Studyなどを意味する。こうした研究は、CADU 中の Drug を、健康食品成分に置き換えた Computer-aided Nutraceutical Study とでも呼ぶべき領域である。医薬品開発においても、現在、老化の生物学と、それに基づく治療薬（対策薬？）の開発が、一部の研究者の関心を惹いている。そこには、「老化が現在広がっている、がん、肥満、糖尿病、アルツハイマー疾患などの主たる原因であり、この過程を制御する薬は、複数の疾患に効果を示す」、という期待がある。このような研究は、医食同源の科学、あるいは薬食同源の科学と呼ぶこともできよう。

しかしながら、現時点におけるキャドゥアライアンスも ICA も、活動費の余裕があるわけではないので、我々の目標は、現在は、異なる分野や立場にいる研究者や関係者の出会いの場を提供し、情報交換と人の交流が始まって、やがてコミュニティが生まれてくるような人のネットワークを構築することだと考えている。

肝心の CADU Platform の構築は、事務局のスタッフの協力をえてプロトタイプを作成を進めているが、次の段階では、CBI 学会を始めとする、それぞれの領域の研究者の方々に協力していただきたいと考えている。

3. ICA のオープンアカデミア事業

サイバー絆研究所 (Institute for Cyber Associates, ICA) は、主に組織に属していない幅広い世代の知識労働者(Knowledge Worker)たちが、PC (パソコン)、インターネット、高性能の携帯電話 (Smart Phone)など、いわゆる ICT を活用することによって、社会との絆を維持しつつ、自ら雇用やビジネスの機会を創出していく活動を支援することを使命 Mission としている。ICA のオープンアカデミア事業は、この使命を、主としてデジタルな教育学習 Digital Teaching and Learning (DT&L) 事業を推進することによって遂行することを目的としている。

現在、いわゆる団塊の世代の退職が本格化していく時期になった。退職された知的な労働者の多くは、「悠々知的」な、生活を楽しまれている方が多いようであるが、そうした生活が、やがて「悠々痴知的」と「やまいだれ」がついてしまう確率は、85歳の時点で女性が3分の1、男性で5分の1と言われている。したがって、そうした予防も含めて、健康に関心もつことと、学習を続けることは、「知 → 痴」への移行を予防する効果的な対策ではないかと考えている。

したがって、ICA のオープンアカデミアは、語学や、我々が MUC (Mobile/Ubiquitous/Cloud) と呼んでいる、現在のインターネットの第2の革命の推進役になっている、スマートフォン、タブレット PC, クラウドなどを使うこと、3D プリンターを使った Open Collaboration によるものづくりなど、楽しく学ぶ機会を提供することを、考えている。こうした学びの参考となるサイトやコンテンツについては、すでに収集して、試しているが、まだ、サイトにアップはしていない。これらのサイトが発展していくためには、同好の士が、ある程度集まる必要がある。それには、もう少し時間が掛かると思われる。

ICA では、このサイトに、退職世代の方々が、ご自分たちの知的な生産物を置いたり、宣伝したりしていただけないかと考えている。現在、そうしたコンテンツを、単独で発信されている方が少なくないが、それが集まった方が、賑やかさが増し、訪れる人もふえ、関係した行事もやりやすくなるであろう。こうしたコンテンツが集まることによって、サイトは、気軽なアカデミア（知的な交流の場）となる。そこはまた、退職世代と若手世代との交流の機会となるであろうし、MUC 技術に関心をもつことは、若手世代との自然な交流を促すことにつながると、期待している。

さらに ICA では、こうした知的集団として、電子的な学術雑誌を共同購入する可能性も検討している。つまり、閲覧頻度の低い雑誌に関しては、共同で購入することによって、個人の経費を抑えることができるのではないか、という発想である。

オープンコースは、世界の著名な大学が、競って関心を示し、実験的な取り組みを始めているが、使用している教材、とくに図や写真の著作権に関わる問題への対処が難しく、手間と経費がかかる。したがって実験的な試みはともかく、実際のコンテンツを提供するには、時間と手間と経費が必要になる。こうした障害を認識しながらも、あえて、こうした事業に挑もうとするなら、それなりの理由と事業としての強みがなければならない。

そこで ICA としては、キャドゥアライアンスとして、継承した事業の一部を、ICA の実験的なオープンコースとして、実験的に実現してみることにした。

4. 自然科学と情報計算技法に関するオープンコース

現在、ICA やキャドゥアライアンスとして、実行可能と考えているオープンコースは、3種類ある。

4. 1 「量子、情報、ゲノム」に関する講義

これは、神沼が、広島大学大学院理学部の相田美砂子教授の研究室が中心となって実施した、「ナノ・バイオ・IT」をテーマとする JST の人材養成プロジェクトにおいて、始めた講義を、主な題材として、これをネット配信可能なものにする試みである。その内容は、当初、「物理学と情報学の境界領域」と「生物と計算技法 Bioinformatics」を指向していたが、次第に、量子情報と量子計算に、焦点を合わせるようになった。この講義は、15 コマ（1 コマは 1.5 時間）で、大学院レベルの自然科学系の学生を受講者に想定している。

4. 2 「計算化学から計算創薬へ」の入門講座と実習環境の構築

この構想の出発点は、広大の相田研究室で神沼が提案した、下記の図のような環境の構築である。このような環境は、製薬企業における研究者を対象としているのではなく、大学での創薬研究や創薬教育に使われることを想定しており、「アカデミアに計算創薬環境を開放する」ことをめざしている。

この構想は翌年、実習にまで漕ぎつけた。その後、同じような目的の教育的なシステムの開発（マシンは CBI 学会の PC クラスタ）が、東工大（小長谷明彦教授）と東京医科歯科大（田中博教授）の大学院の共同教育プログラムとして行われ、こちらも実習にまで漕ぎ着けた。広大の実験には、原田隆範博士を中心として、これに学外の中野達也博士、福澤薫博士、日向寺祥子博士、小宮山直美氏らと私が協力した。東工大のプログラムでは上林正巳氏（当時、東工大の特任教授）や中田吉郎氏（群馬大学名誉教授）がハードとソフト、および教材の開発に関わった。

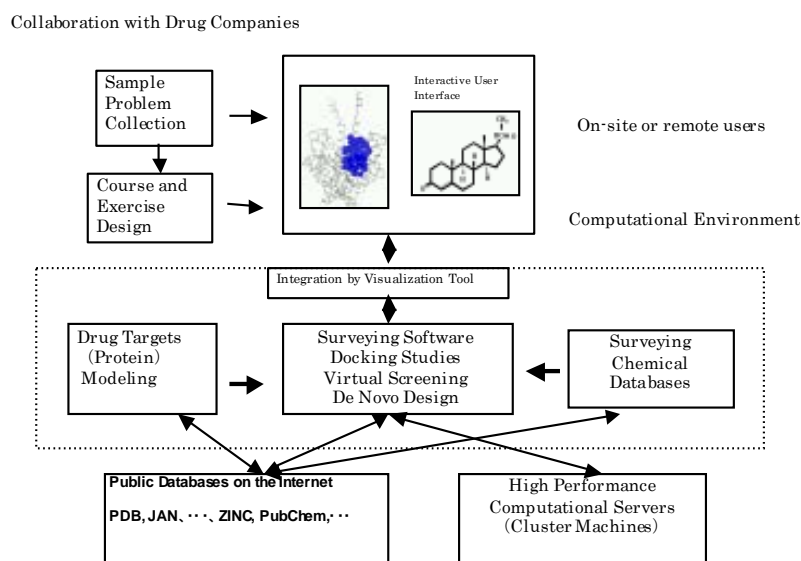


Image of the Workbench for Drug Discovery in Academia
広島大学相田美砂子研究室、科研費(2006-2007)

図2. 計算創薬研究のアカデミアへの開放をめざした実験システムの概念図。

昨年からはじめた、新たな CADU Platform 事業では、後者のシステムの完成度を高め AutoDock や GAMES, FMO のような一般に公開されている計算資源と、同じく一般に公開されている化合物データベースを利用した、できるだけオープンな講座を作成すること

を目標としてきたが、その後、下記の Sutch らの報告を知り、計画を若干拡大することにした。その要点は、以下で述べるように、いずれもほぼ無料のオープンコースを2つ用意し、標準的な計算と FMO 法によるハイレベルな計算の双方を、多くの研究室で実行できるようにすることである。

基盤環境 1

これは下記の文献で紹介されている、ウェブ上のほぼ自由に使えるソフトを組み合わせた創薬実習を可能にするものである。

・ B. T. Sutch et al, Integrated Teaching of Structure-Based Drug Design and Biopharmaceutics: A Computer-Based Approach, Journal of Chemical Education, 89: 45-51, 2012.

基盤環境 2

これは、これまで CBI 学会の有志が開発、整備してきた FMO 計算が可能な環境を、さらに広く開放することを目的として、上林正巳氏（現 POEM）を中心として整備してきた、FMO 法の計算が可能なスタンドアロンの（PC クラスタ）システムである。このシステムの整備とその上の教材の開発を続け、完成度を高め、ネットからの遠隔利用と自分の環境においてスタンドアロンで使う、という 2 種類の使い方に対応することが、この構想の目的である。

ここでも、重要なのはいろいろなケースが学べる教材の開発であり、そのためには教育を目的とする大学の研究室をむすんだようなコミュニティ（ネットワーク）づくりが、課題となる。また、Essential CADD（Computer-aided drug discovery）のようなテキストの作成も課題である。

（3）製薬企業の研究者を対象とした実践的な課程

創薬研究に必要な計算化学系のソフトやデータベースのほとんどは、商品として提供されているものが多い。それらは使いやすく、よく関係されており、時間を争う製薬企業の仕事に使うには、教育用に使える無料ソフトの及ばない長所がある。CADU Platform では、そうした商品ソフトとその利点についても、積極的に紹介することをめざしている。なぜなら CADU Platform は、計算創薬の Show Room ないし Showcase をめざしているからである。また、Solution の提供者と使い手との情報交換や出会いの機会も積極的につくりたいと考えている。

（4）計算創薬の上級課程 Advanced CADD Course

CADU Platform 事業では、計算創薬の技法自身の研究開発や、その成果としてのソフ

トウェア開発を何らかの形で支援することも視野に入れている。その具体的な目標のひとつは、**FMO** の開発の支援である。これについては、すでに多田幸雄博士（東京大学創薬オープンイノベーションセンター特任研究員）による **CBI** 学会を基盤とした利用研究会（**FMO** 研究会）がある。そこでは多田博士を中心として、北浦和夫（名誉）教授を含む、さまざまな研究者が協力した、コミュニティが形成されている。このような専門家たちによって開発された教程や教材を、ネットを介して紹介する可能性も検討している。

4. 3 ゲノム学入門—講座と教材

神沼は、相田研究室の人材養成プロジェクトから、一年遅れて発足した、東京医科歯科大学の田中博教授の、オミックスに関連した人材養成プロジェクトに関わって、いくつかの講義をもった経験がある。その続きのように、現在、田中研究室とバイオインフォマテックスの新しいフロンティアとしてのゲノム学 **Genomics** に関する人材養成を、ネット講義によって行えないか検討している。

その詳しい内容については、この講演会のもう一つの資料「専門職としてのバイオインフォマテックスの未来」に譲るが、これは、もともと、**CADU Platform** の一つの事業と考えていた、「はじめに」の（3）の「医薬品の研究開発と適切な使用のためのバイオインフォマテックスの参照サイトの構築」に代わるものである。

計算化学や計算創薬と違って、バイオインフォマテックスの関心領域は、動きが激しく、また、内容の更新も激しいので、通常のような教科書による講義では、追いつかなくなっている。一方で、**Genomics** の素養は、多くの研究者や医療従事者だけでなく、**Consumers** と呼ばれる、一般の生活者（患者、市民など）にも必要とされるようになってきている。

そうした教育重要を満たすためには、新しい学習と教育の仕組みを創造する必要がある。しかも、その必要性は、急激に高まっている。そこで田中博研究室と神沼らは、これを **ICA** とキャドゥアライアンスと活動として、オミックス医療研究会、**CBI** 学会、その他の学会や研究会と連携しながら、取り組んでみられないか、検討を始めている。

5. 共通する課題

以上、いくつかの講座や教材開発の可能性について、具体的に紹介してきたが、振り返ると約 10 年近くの実践経験を踏まえ、いくつかの問題点が明らかになってきた。

（1）上記で紹介した講義や教材の源泉は、**JST** の人材養成プロジェクトにある。そうしたプロジェクトには、少なからざる研究費が配布されているが、それらから、よい講義や教材を開発することは、そうやさしいことではない。その最も大きな理由は、これらの研

究費が、「人材養成」を名目にしながら、実際の評価は、他の研究費と同じ、どれだけの「発見的な」研究成果が、雑誌に発表されたかという、一般の科学研究費と違いのない尺度で、行われているからだ。当然、若手研究者が、実際の教材開発や実験に、かなりの時間を割くことは難しくなる。さらに、プロジェクトが終了（解散）した場合、その成果の一部である講義の録画や、教材を維持、継承、発展させることが、ほとんど不可能になってしまう怖れがある。生物医学のような、現在、進歩が激しい領域においては、内容の急速な劣化が避けられないことになる。

(2) 進歩が早いことは、学習教育の環境となる計算機と通信環境についても同じである。ここでも、コンテンツを新しい機器やソフトウェア環境へ移行させておかなければ、使えなくなってしまう怖れがある。とくに、これからのことを考えると、スマートフォンやMUCの活用が重要な課題になる。ただ、MUCでのシステムづくりは、研究者が慣れているPCと違った難しさがある。

(3) 結局、継続的に発展させていける講義や教材を開発するためには、開発のためのコミュニティと学ぶ側のコミュニティ、さらに、継続的な活動資金の裏付けが必要になる。それを可能にするのは、提供しているサービスに見合う、活動するための収入がえられることである。

(4) 最後に、ビデオ教材の作成と配信の計算機環境がある。例えば、YouTubeのような無料の環境を使う場合は、配信するコンテンツの量に関する制限を受けることがある。どのようなネット環境を用意するかは、コストに直結する問題である。ICAの場合は、まだ、本格的なコンテンツの作成と配信を経験していないので、あまり不便を感じていないが、これも大きな問題である。

多くのネット講義やセミナーのネット配信が、世界的に著名な大学や、NIHのような規模の大きな研究機関でなされているのは、上のような事情があるからだと思われる。日本におけるこの種に事業でいつも問題になるのは、英語にするか、日本語にするかである。ICAのオープンアカデミアの立場は、「日本語を基盤とするが、英語の壁を乗り越えられるような人材の育成を意識する」というものである。

6. おわりに

ICAが、キャドゥアライアンスと共に展開していこうとしている、オープンコースによる、人材育成の概略を説明した。すべてまだ、これからの事業であるが、ここに至るまでに協力してくださった研究者の方々の数は、決して少なくない。学問も、研究も、教育も、

大切なのは継続、継承することである。とくに、競争的な資金で行われた研究事業の多くは、一時の成果があがっても、論文に記載されない、経験的な知識や技能の継承がなされないことが多い。ICA のオープンコース事業は、そうした損失を少しでも軽減する可能性がある。

こうした講座や教材を開発していくことは、骨が折れる地味な活動であるが、学校の創設と同じように、有意義な活動ではないかと考えており、より多くの方々が関心をもっていただくとともに、協力していただけたらと願っている。

参考資料

神沼二眞、薬の研究開発の情報交換サイト”CADU Platform”構築と人材養成：ひとつの提言、生命医薬情報学連合大会併設ワークショップ（15日 16:00~17:30）「情報計算化学とバイオインフォマティクスのオンライン教育」資料。

(http://join-ica.org/hiicomp/document/forecast/cf09_ws1_back.pdf)