

独立行政法人科学技術振興機構
バイオインフォマティクス推進センター事業
追跡評価報告書

- ・ 生命情報データベースの高度化・標準化
(第Ⅱ期：平成 18 年度採択課題)
- ・ 創造的な生物・情報知識融合型の研究開発
(平成 17 年度～21 年度採択課題)

平成 27 年 3 月

独立行政法人科学技術振興機構

目次

I. 追跡評価の概要.....	1
1. 追跡評価の目的.....	1
2. 対象課題.....	1
3. 評価者.....	4
4. 評価方法.....	4
4. 1 追跡調査.....	4
4. 2 追跡評価.....	4
II. 評価結果.....	5
【生命情報データベースの高度化・標準化】	
1. 「ホヤプロテイン統合データベースの構築」.....	5
2. 「ゲノムと環境の統合解析による生命システムの機能解読 (KEGG)」.....	7
3. 「バイオ基幹情報資源の高準化と共用化」.....	9
4. 「オントロジーによるパスウェイの高度化および国際標準化 (INOH パスウェイデータベース)」.....	11
5. 「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化 (PDBj)」.....	13
6. 「メタボローム MS スペクトル統合データベースの開発 (Metabolome-Mass Spectral Database)」.....	15
7. 「マルチモーダル統合バイオ DB (Multimodal BIODB)」.....	17
【創造的な生物・情報知識融合型の研究開発】	
1. 「大規模な比較ゲノム研究を展開するためのワークベンチの構築/大規模比較ゲノムワークベンチの実践的応用に向けた研究開発」.....	19
2. 「タンパク質の構造・機能予測法の開発とヒトゲノム配列への適用/タンパク質の構造・機能・相互作用予測システムの開発と展開」.....	21
3. 「脳スライス中で可視化した神経シナプスの自動解析」.....	23
4. 「ヒト胚の形態発生に関する三次元データベース」.....	25
5. 「実践による超分子複合体モデリングシステムの開発/実践による超分子ネットワークモデリングシステムの開発」.....	27
6. 「マウスを用いた脳機能表現型データベースの開発」.....	29
7. 「予測技術を用いた生命システムの同定手法の開発」.....	31
8. 「メタゲノムオーソログ遺伝子統合解析システムの開発/メタゲノム統合解析システムの開発」.....	33
9. 「タンパク質化合物相互作用の網羅的予測手法とデータベースの開発」.....	35
10. 「高精度タンパク質間相互作用予測システムの開発」.....	37
11. 「転写制御領域の構築原理解明」.....	39
12. 「酵素反応分類に基づく酵素反応予測システムの開発」.....	41
13. 「進化型計算と自己組織化による適応的画像分類法の開発」.....	42
14. 「生命科学上の非構造化データの統合マイニング」.....	44
15. 「ダイナミクスを考慮した膜蛋白質の構造モデリング法の開発」.....	46

I. 追跡評価の概要

1. 追跡評価の目的

本報告書は、独立行政法人科学技術振興機構（JST）が実施したバイオインフォマティクス推進センターの追跡調査結果を報告するものである。

追跡評価は、事後評価を終えて2年以上経過した課題について、副次的効果を含めて研究開発成果の発展状況や活用状況等を明らかにし、事業及び事業運営の改善に資することを目的として実施した。

2. 対象課題

【生命情報データベースの高度化・標準化】

番号	研究開発課題名	代表研究者(採択時所属)	研究開発期間
1	ホヤプロテイン統合データベースの構築	稲葉 一男 (筑波大学下田臨海実験センター 教授)	平成18年度 ～22年度
2	ゲノムと環境の統合解析による生命システムの機能解読 (KEGG)	金久 實 (京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター 教授)	平成18年度 ～22年度
3	バイオ基幹情報資源の高準化と共用化	菅原 秀明 (国立遺伝学研究所 生命情報・DDBJ 研究センター 教授)	平成18年度 ～22年度
4	オントロジーによるパスウェイの高度化および国際標準化 (INOH パスウェイデータベース)	高木 利久 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)	平成18年度 ～22年度
5	蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化 (PDBj)	中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所 教授)	平成18年度 ～22年度
6	メタボローム MS スペクトル統合データベースの開発 (Metabolome-Mass Spectral Database)	西岡 孝明 (慶應義塾大学大学院政策・メディア研究科先端生命科学研究科 教授)	平成18年度 ～22年度
7	マルチモーダル統合バイオDB (Multimodal BIODB)	森下 真一 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)	平成18年度 ～22年度

【創造的な生物・情報知識融合型の研究開発】

番号	研究開発課題名	代表研究者(採択時所属)	研究開発期間(※)
1	大規模な比較ゲノム研究を展開するためのワークベンチの構築	内山 郁夫 (自然科学研究機構基礎生物学研究所 助手)	平成 17 年度 ～20 年度
	大規模比較ゲノムワークベンチの実践的応用に向けた研究開発	内山 郁夫 (自然科学研究機構基礎生物学研究所 助教)	平成 20 年度 ～22 年度
2	タンパク質の構造・機能予測法の開発とヒトゲノム配列への適用	太田 元規 (東京工業大学学術国際情報センター 助教授)	平成 17 年度 ～20 年度
	タンパク質の構造・機能・相互作用予測システムの開発と展開	太田 元規 (名古屋大学大学院情報科学研究科 教授)	平成 20 年度 ～22 年度
3	脳スライス中で可視化した神経シナプスの自動解析	川戸 佳 (東京大学大学院総合文化研究科 教授)	平成 17 年度 ～20 年度
4	ヒト胚の形態発生に関する三次元データベース	塩田 浩平 (京都大学大学院医学研究科 教授)	平成 17 年度 ～20 年度
	ヒト胚の形態発生に関する三次元データベース	塩田 浩平 (京都大学大学院医学研究科 教授)	平成 20 年度 ～22 年度
5	実践による超分子複合体モデリングシステムの開発	白井 剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)	平成 17 年度 ～20 年度
	実践による超分子ネットワークモデリングシステムの開発	白井 剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)	平成 20 年度 ～22 年度
6	マウスを用いた脳機能表現型データベースの開発	宮川 剛 (京都大学大学院医学研究科 助教授)	平成 17 年度 ～20 年度
7	予測技術を用いた生命システムの同定手法の開発	石井 信 (奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科 教授)	平成 18 年度 ～21 年度
8	メタゲノムオーソログ遺伝子統合解析システムの開発	黒川 顕 (奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科 助教授)	平成 18 年度 ～21 年度
	メタゲノム統合解析システムの開発	黒川 顕 (東京工業大学大学院生命理工学研究科 教授)	平成 21 年度 ～23 年度

番号	研究開発課題名	代表研究者(採択時所属)	研究開発期間(*)
9	タンパク質化合物相互作用の網羅的予測手法とデータベースの開発	榊原 康文 (慶應義塾大学理工学部 教授)	平成 18 年度 ～21 年度
	タンパク質化合物相互作用の網羅的予測手法とデータベースの開発	榊原 康文 (慶應義塾大学理工学部 教授)	平成 21 年度 ～23 年度
10	高精度タンパク質間相互作用予測システムの開発	清水 謙多郎 (東京大学大学院農学生命科学研究科 教授)	平成 18 年度 ～21 年度
	高精度タンパク質間相互作用予測システムの開発	清水 謙多郎 (東京大学大学院農学生命科学研究科 教授)	平成 21 年度 ～23 年度
11	転写制御領域の構築原理解明	中井 謙太 (東京大学医科学研究所 教授)	平成 18 年度 ～21 年度
12	酵素反応分類に基づく酵素反応予測システムの開発	長野 希美 (産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター 主任研究員)	平成 19 年度 ～22 年度
13	進化型計算と自己組織化による適応的画像分類法の開発	馳澤 盛一郎 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)	平成 19 年度 ～22 年度
14	生命科学上の非構造化データの統合マイニング	馬見塚 拓 (京都大学化学研究所 教授)	平成 19 年度 ～22 年度
15	ダイナミクスを考慮した膜蛋白質の構造モデリング法の開発	水口 賢司 (医薬基盤研究所 バイオインフォマテイクスプロジェクト プロジェクトリーダー)	平成 19 年度 ～22 年度

*研究開発期間は、研究開始年度 10 月から研究終了年度 9 月まで。ただし平成 18 年度採択課題については、研究開始年度 11 月から研究終了年度 9 月まで。

3. 評価者

主査	小原 雄治	国立遺伝学研究所 特任教授 ライフサイエンス統合データベースセンター センター長
委員	漆原 秀子	筑波大学生命環境系 教授
	白髭 克彦	東京大学分子細胞生物学研究所 教授
	諏訪 牧子	青山学院大学理工学部化学・生命科学科 教授
	豊柴 博義	武田薬品工業株式会社医薬研究本部 主任研究員
	美宅 成樹	豊田理化学研究所 客員フェロー

(五十音順)

4. 評価方法

4. 1 追跡調査

追跡評価の対象である「生命情報データベースの高度化・標準化（7 課題）」、及び「創造的な生物・情報知識融合型の研究開発（15 課題）」について、追跡調査を行った。

追跡調査項目は、（1）調査対象課題の公開データ（中間評価、事後評価、終了報告書、研究実施報告書）による研究成果の把握、（2）論文引用数などのデータベース調査、（3）研究代表者へのアンケート調査による、その後の研究の発展状況や研究開発成果の波及効果、研究成果の利用状況、参画した研究員等の動向等である。これらの結果を踏まえ、追跡調査報告書を作成した。

4. 2 追跡評価

追跡調査報告書を元に、以下の視点で、追跡評価委員による評価を実施した。

（ア）研究成果の活用状況や発展状況に関する評価

- ・構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況はどうか。
- ・研究終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況はどうか。

（イ）研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果・効用に関する評価

- ・バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献はどうか。
- ・新しい分野の人材育成の面での貢献はどうか。
- ・社会的及び経済的な効果はどうか。

（ウ）総合評価

- ・総合的に判断して以下のどの評価に当てはまるか。
 - S) 十分な活用がなされている。
 - A) 活用がなされている。
 - B) 活用がやや不足している。
 - C) 活用が不足している。

II. 評価結果

【生命情報データベースの高度化・標準化】

1. 「ホヤプロテイン統合データベースの構築」

稲葉 一男（筑波大学下田臨海実験センター 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

課題で開発された、ホヤタンパク質に関する分子情報、発現情報、オルソログ情報などを提供することを目的としたデータベース CIPRO (Ciona intestinalis Protein Database) は「ホヤウェブポータル」(フランス国立科学センター;CNRS) からリンクが張られており、ホヤタンパク質データベースの国際標準として認識され、この分野で世界的に著名な専門雑誌に多数引用されている。また、FABA (Four-dimensional Ascidian Body Atlas) の引用論文も発表されておりコミュニティの中で一定の役割を果たしていることが認められる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

本研究開発の中心となる CIPRO データベースは研究期間終了後もデータのアップデートがされており、その他開発した Ghost、FABA、FABA2 (Four-dimensional Ascidian Body Atlas Ver. 2)、ACBD (Ascidians Chemical Biological Database)、CiAID (Ciona intestinalis Adult In situ hybridization Database) 等へもリンクされていて種々の情報が得られる構造になっている。

課題終了後は、データベースの維持と発展のために様々な外部資金獲得を目指す活動を行っており、出来る範囲でのブラッシュアップ、拡張、維持が行われている。国際連携が進行しているホヤの研究分野において、CIPRO は、中心的役割を果たしつつあることは高く評価できる。さらに、ホヤの研究分野において貴重なデータベースであるので、ぜひ公開し続けることを期待したい。今後他生物のデータとのリンク、比較が可能になることで、汎用性が増すと考えられる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究開発は、実験系研究者の参加によりシステム開発が行われたという点でユニークであり、また、数値化されたデータだけでなく、画像データなどの様々な実験データを有機的取り込む手法は、今後のデータベース統合化に対して1つのモデルとなっている。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

一部の研究者や課題終了時の学生等の多くが、追跡調査時の所属が不明となっており、評価が難しい部分もあるが、本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は6名おり、人材育成という面で貢献していると思われる。

3) 社会的及び経済的な効果

現在までのところ応用に発展した例は見受けられないが、ホヤはモデル生物としてとらえた場合ショウジョウバエより系統的にヒトに近く、また、進化上極めて重要な位置を占めているので他のデータとの連携比較により、今後社会的、経済的意義はもたらされると考えられる。また、今後、海洋科学や環境科学の観点から、海洋生物のデータベースが増加すると予想され、本データベースはそれらのモデルケースになる可能性が高く、今後の波及効果が期待される。

ウ. 総合評価

A) 活用がなされている。

活用がコミュニティ内にとどまっており、当初予定していた他生物種との有機的リンク等が達成されていないという点から、アプローチや手法、コンテンツなどが広く利用されるための取組は不足していると考えられる部分もある。しかしながら、本課題はホヤという特定の研究対象生物種についてのゲノム、プロテオーム、フェノーム等の情報を統合し、広く研究者コミュニティに公開しているという点で重要なデータベースとなっている。

2. 「ゲノムと環境の統合解析による生命システムの機能解読 (KEGG)」

金久 實 (京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター 教授)

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

遺伝子・タンパク質などに関するゲノム情報と生体内物質・生体外物質に関する化学情報を分子ネットワークのレベルで統合した KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genome) は、月間 18 万～50 万の訪問者数がある。また、インパクトファクターの高い雑誌をはじめ、様々な論文で 1,000 件/年以上も引用されており、国際的にも広く活用されているといえる。さらに、API や KEGG データベースを利用したツールの開発が行われるなど、その活用の幅は広く、KEGG はゲノム、メタボローム、メタゲノムをはじめとした大量データを解読するためのレファレンスとして、我が国を代表する国際標準データベースとなっている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

課題終了後も、データベースの維持・発展に向けて、自動化アノテーションツール KAAS (KEGG Automatic Annotation Server) の構築、さらに、疾患、医薬品開発に資することができる新規データベース (KEGG MEDICUS) の開発については、JST バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) のライフサイエンスデータベース統合推進事業 統合化推進プログラムによる支援を受けるなど、順調に発展しており、継続して努力が見られる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

KEGG は、米国 NCBI (National Center for Biotechnology Information) にレファレンスとして利用されるなど、信頼性の高い、国際的に認知されたデータベースとして広くバイオインフォマティクス分野の研究に大きく貢献している。現在、次世代シーケンサーなどの進歩に伴い、多数の生物種ゲノム、個人ゲノム、メタゲノムなどのデータを迅速かつ大量に決定できるようになり、遺伝子の機能、総体としての高次生命システム機能を自動的に解読する情報技術が必要とされる。KEGG はこのようなニーズに迅速に対応しゲノム機能解読の国際標準として国内外の生物学者に広く利用され、ライフサイエンス分野全体にも貢献しているといえる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は 5 名おり、キャリアアップしていたことから本課題が人材養成の面で貢献しているといえる。

3) 社会的及び経済的な効果

様々なツールが開発され、本研究成果を2次利用する活動が見られる。企業からのライセンス購入の実績もあり、企業などで応用に向けて利用されている。特に、医療関係では、薬の開発に貢献し、また、病院・医療現場での利用もされている。疾患・医薬品データに副作用情報なども加え高度化すると同時に、社会的ニーズの高いデータを、ゲノム情報・生命システム情報と統合化し、一般の人々にも提供できる有用なリソースへ発展することが期待される。今後、マイクロバイオーームなど、腸内の細菌による疾患への関連などへも幅広い利用の可能性があり、次世代シーケンサーの普及とともに、KEGGの医療現場、創薬における重要性は益々高まると考えられる。

ウ. 総合評価

S) 十分な活用がなされている。

データベースとしての認知度、質、分野の発展など、様々な方面ですばらしい成果を挙げている。日本国内だけでなく、世界的にも広く知られたデータベースであり、日本を代表するデータベースとなっている。

3. 「バイオ基幹情報資源の高準化と共有化」

菅原 秀明（国立遺伝学研究所 生命情報・DDBJ 研究センター 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

ツールによって使われ方にばらつきはあるが、DDBJ (DNA Data Bank of Japan) を中心に内容の拡大が図られており、数百～二万件/年を超える訪問者数があり、論文への引用も多数ある。さらに、米国 NCBI (National Center for Biotechnology Information) や欧州 EBI (European Bioinformatics Institute) などから DRA (DDBJ Sequence Read Archive) に登録するメタデータを作成するツールである MetaDefine が高く評価されるなど、様々なデータを統合して利用する研究に利用されている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

様々なデータベースが、スパコンシステムの更新で利用中止になっている点は残念であるが、引き続き無料公開中のものは DDBJ に移管され、国際塩基配列データバンクの一翼を担っている。また、本研究開発で手掛けた Web API 技術は、今日ではバイオインフォマティクス分野で当然のように利用されており、さらに DDBJ の全件データへの大規模な RDF 化は、海外での各種データベースの RDF でのデータ提供につながった。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

NCBI や EBI との協力関係を構築し、また、メタデータ作成ツールである MetaDefine のソースコードを NCBI および EBI に提供するなど、国際的な研究基盤整備に貢献している。基盤となるデータベースとツールの開発は、特に微生物ゲノム解析の普及と発展に貢献している。また、代表者らの論文（(2011) Nucleic Acids Res.）は、微生物学、分子生物学、遺伝学、生理学にとどまらず臨床医学、コンピューターサイエンス、数学、植物学、動物学などの広い分野で引用されていることから、広くライフサイエンス分野の研究へ貢献しているといえる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発の終了後、1 名が新しくポジションを得た。参画したほとんどのメンバーは、当時既に教授、助教等であり、キャリアアップした人数は少ないものの、人材育成の面で貢献したといえる。

3) 社会的及び経済的な効果

本データベースは、国際塩基配列データバンク共同事業の一翼を担っており、特に、DDBJ SRA(Sequence Read Archive)と DDBJ TA(Trace Archive)は、研究コミュニティの支援ならびに国際共同事業において貢献している。経済的な効果としてあげるのは難しいが、広くライフサイエンス分野の研究の基盤となるデータベースである。

ウ. 総合評価

(S) 十分な活用がなされている。

DDBJ は国際塩基配列データバンク共同事業の一翼を担う国際的に重要なアクティビティであり、日本の基幹データベースとして、十分な活用がなされていると判断する。今後、メタゲノムの解析は、マイクロバイオーームなどへの発展的な利用が考えるため、一層の利用拡大も期待できる。

4. 「オントロジーによるパスウェイの高度化および国際標準化（INOH パスウェイデータベース）」

高木 利久（東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

計算機が処理可能な形式でパスウェイ情報を統合した INOH 関連データベース、及びソフトウェアは、訪問者数が年間数十～数千と利用者は限定されているようだが、統計解析パッケージ R でのアプリケーションが開発されるなど、応用性はある。パスウェイデータの標準化に関する BioPAX (Biological Pathway Exchange) の論文は、海外からの引用回数も多く、国内外で利用されている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

開発されたデータベース及びソフトウェアは、国際的なパスウェイ記述形式の一つである BioPax に対応し、今後得られる様々なデータに対応できる形になっている。国際的にリードをするというアクティビティにはなっていないが、開発されたデータベースは継続公開されており、他のサイトからのリンク、検索対象となるなどの進展はある。ただし、プロジェクトの終了とともにデータベースの更新、開発も終了している点は残念であり、継続的なデータの更新が期待される。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究開発は、将来、応用プログラムが直接利用することを想定してパスウェイ統合を目指した独自性の高いものである。BioPax のフォーマットを採用し、バイオインフォマティクス分野でのデータベースの利用を高め、さらに、新しいパスウェイの記述方法を提案するなど、この分野で大きく貢献したといえる。また、本データベースは、ある程度プログラムなどが扱える者を利用対象としていることを考えると、医療分野、創薬分野での利用は限定的な印象もある中、生物学・遺伝学などの分野をはじめ、数学・コンピューターサイエンス、臨床研究・薬理学研究など様々な分野からの引用もある。細胞から個体レベルの生物学や医科学・創薬等の分野が、今後の展開としてパスウェイ解析に立脚せざるを得ないことは明らかであり、その先駆としてパスウェイデータの統合化に先鞭をつけたことはライフサイエンス分野へも貢献したといえる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

参加者が少ない中、本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は3名おり、本課題が人材育成という面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

データベースは広く社会的に認知されるには時間がかかるものであり、INOH は将来的には有用であると期待されるものの、現時点では応用に向けての研究の継承・発展状況は把握されていない。

ウ. 総合評価

A) 活用がなされている。

本データベースは、利用対象を専門的な情報処理能力がある程度ある者としている点を考慮すると、その広がりは限定的とも思えるが、汎用性は高いと考えられる。国際的に知られた BioPax などへの貢献もあり将来的な活用が期待されるテーマであるが、より積極的な論文発表、講演、共同研究など利用促進への取り組みがあればより一層の活用を促進できたのではないかと考えられる。

5. 「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化 (PDBj)」

中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所 教授)

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

蛋白質の立体構造情報基盤として生命現象の分子メカニズムを解明しようとする構造生物学は今日著しい進展を見せており、そのためのデータベース整備は必須である。PDBj (Protein Data Bank Japan) は国際連携による PDB 自体の高度化、効率化に貢献するとともに、各種データベースやプログラムもさらに改良し、継続的な運用を行っている。構造生命科学、薬学、情報科学、計算科学分野での研究ならびに産業応用などの利用例も挙げられている。各データベース、ソフトウェア等へのアクセス数は高いものでは十万件/月を超えており、国際的に非常に利用されている。本データベースの利用者層は多岐にわたっており、十分に活用されており、今後の活用も期待できる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

本課題は後継プログラムとして JST バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) のライフサイエンスデータベース統合推進事業 統合化推進プログラムに採択され、PDBj の運営を継続実施するとともに、他の生命データベースとの統合化による高次生命機能の理解に資する研究開発を行っている。RDF (Resource Description Framework) による PDB と BMRB (Biological Magnetic Resonance Data Bank) の記述を世界に先駆けて開発し、後に欧州 EBI や Wisconsin 大学の研究者と協力して高度化することによって世界標準として採用されていること、さらに、世界中で決定された構造の約 1/4 のデータ登録を実施し、国際組織の一翼を担う主要な組織になっていることから、成果が十分に発展しているといえる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本課題でいち早く取り組んだ RDF 化に関しては、セマンティックウェブ形式でデータ統合を進めるバイオインフォマティクスの基盤となっている。また、本課題による蛋白質に関する構造情報の提供は今日のライフサイエンス分野の研究者にとって欠かせない基礎情報となっており、企業研究者に対してもツールを提供して応用研究を促進し、さらに、「eProtS: タンパク質構造百科事典」および「今月の分子」の日本語版の公開により、蛋白質の役割を紹介し教育にも貢献した。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は 8 名いた。また、多くのメンバーが現在でも研究に携わっていることから、本課題が人材育成という面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

PDBj の蛋白質の構造情報は様々な分野で利用されている。新たな研究や応用の展開に至った例として大学での GPCR (G protein-coupled receptor) 研究と製薬企業の非ペプチド化研究が挙げられており、産業にも大きなインパクトを与えた。PDBj データベースは、ゲノム情報と並び、科学的発見や応用開発に必要な情報を提供しており、特に創薬研究への経済的効果が大きいと期待される。

ウ. 総合評価

S) 十分な活用がなされている。

本データベースは、国際的なデータベースの重要な一翼であり、データベースとしての価値、その運用状況からも十分に活用されている。今後ますます必要性が高まると考えられ、今後の活用も期待される。

6. 「メタボローム MS スペクトル統合データベースの開発 (Metabolome-Mass Spectral Database)」

西岡 孝明 (慶應義塾大学大学院政策・メディア研究科先端生命科学研究
所 教授)

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

化合物のマススペクトル (MS) データを収集した MassBank は、月間 1 万以上の訪問者数があり、国内のみならず、ヨーロッパ、さらに米国からや中国、韓国、ブラジル、南アフリカ等各国からのアクセスがある。主要論文の海外からの引用回数も高く、世界規模で広く使われており、世界的な標準データベースの地位を確立している。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

MassBank は NORMAN Network グループ (EU 加盟国の環境科学研究機関連合体) が公式データベースとして採用、ドイツでミラー運用もされているなど、国際的評価が高い。また、脂質データベースである LipidBank を日本動脈硬化学会と連携して開発するなど、国内外で多くの機関と共同開発拠点を形成しており、研究開発成果が発展している。さらに、高精度データの更新等にも迅速に対応しており今後の展開が楽しみである。また、本研究で開発された KNApSACk (生物種 - 代謝物関係データベース) は、特に農学、生態学、医学など広範な分野で利用されている。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究開発は、バイナリ形式による保存のために妨げられていた MS データの共有を一元管理するために分散型データベース方式を採用するなど、分散型データベースの欠点とそれへの対処を実践した例としても貴重であり、バイオインフォマティクス分野へ貢献しているといえる。MassBank は、日本質量分析学会の公式データベースとなり、国際メタボロミクス学会の中でも無償データベースの草分けとして認知されている。米国 NIH (National Institute of Health) のファーマコメタボロミクス研究ネットワーク、欧州 EBI (European Bioinformatics Institute) の大規模なメタボロームデータベースである MetaboLights の構築を誘導するなど、本データベースにより二次代謝物の同定率の向上と推定が可能になったことによって、ライフサイエンス分野におけるメタボローム研究が活性化されている。二次代謝物がゲノム情報とリンクされることによって、医薬開発や診断、予防、健康維持などの科学技術分野に今後大きく寄与すると予想できる。

また、MassBank のデータは質量分析で計測されたデータであるが、このデータから化学構造式や代謝物を推定するツールの研究開発が重要である。本課題で開発された二次代謝産物データベースである KNApSACk において候補二次代謝物質の予測ソフトウェアを開発

したが、これを用いたメタボローム研究も増えており、Omics データ処理を容易にし、マ
ススペクトルからの構造推定を行う研究を促した点も評価できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は7名いた。いずれ
も、研究者として活躍しており、多くのメンバーも現在でも研究に携わっていることから、
本課題が人材育成という面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

多くの分析機器メーカーが MassBank にデータを提供し、MassBank 利用ツールを開発す
ることによって MassBank を継承、発展しようとしている。また、質量分析機器メーカーで
ある島津製作所（日本）や Bruker 社は MassBank データの作成や検索をするためのツール
やインターフェースを提供している。また、クックパッドとの連携により、食材生物と機
能性成分の関係に関するデータベース構築を進めるなど、社会的及び経済的な効果が期待さ
れる。

ウ．総合評価

S) 十分な活用がなされている。

メタボローム・マススペクトル統合データベースは、生体にとって重要であり、これま
で発展してきたゲノム関係データベースと関連ツールからだけでは解析しきれない生物デ
ータを対象とし、幅広い分野の研究の推進に貢献するデータベースとして開発されている。
いち早く開発に着手したことから、現在では世界標準として国際的に高い評価を得ており、
基礎生命科学のみならず、医科学、創薬、農学、環境科学等々の分野でも活用され、BIRD
終了後も継続発展しており、今後もさらに発展することが期待される。

7. 「マルチモーダル統合バイオ DB (Multimodal BIODB)」

森下 真一（東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、フェノームといった異なるタイプのバイオデータを統合し、効率よく活用するための統合化システムとして開発されたデータベース、ツール等については、年間約二十万の訪問者数を超えるものもある。ゲノム配列などを様々な種で公開し、ゲノムブラウザーの環境を整えた個人向けのツール (UTGB Toolkit) は、いわゆる生物学者が取っ付きにくい情報解析をより身近なものにするという点から活用されており、国内だけでなく、海外の研究者からも利用されている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

データベースの運用は課題終了後も継続して行われており、線虫や酵母、メダカ、ヒトの疾患に関しての国内の共同研究だけでなく、海外においても多くの研究機関と共同して研究を継続的に発展させており、様々な研究で利用できる点が評価できる。JST CREST からの研究支援を受けて、これまでのデータベースの情報から発生過程における三次元クロマチン構造の動態を観測分析するといった新たな研究を生み出すなど、十分な成果を出しており、「ヌクレオソーム構造が DNA 変異の周期性を引き起こす要因となる」という生物学的にも重要な知見を得るなど、マルチモーダル統合バイオ DB を利用した科学的知見を多数発表するなど、研究の発展が見られる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究で開発した UTGB Toolkit により、パーソナルな環境でゲノムブラウザーを簡単に構築し、超高速シーケンサー等の大量・多様なデータ向けの基盤構築が可能になり、様々な研究室で利用されるようになった。ゲノムブラウザーを個人的に作成して研究できる環境を与え、インフォマティクスをより身近なものにした貢献は大きい。さらに、各種生物を対象とした共同研究にも発展している。モデル動物を使った研究は、ライフサイエンス分野の研究には必要不可欠であり、様々な種のゲノムを扱ったこのようなデータベースの利用は今後も高いと考えられる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は6名おり、本課題が人材育成という面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

ヒトへの研究への応用において、モデル生物のゲノムやエピゲノムを理解することは非常に重要である。UTGB Toolkit によりバイオインフォマティクスデータ利用の普及に努めており、今後、本データベースが、基礎生物学の進展にも貢献することが期待できる。また、企業の製品開発に siRNA を設計する siDirect データベースが利用されるなど、開発ソフトの産業での有効活用も見られ、今後の社会的及び経済的な効果が期待される。

ウ．総合評価

A) 活用がなされている。

トランスクリプトームやエピゲノム、ゲノムを理解することは、生物学的な理解を深める意味で不可欠である。本データベースは包括的に様々なゲノム、トランスクリプトーム情報を提供できるものであり、研究の効率だけでなく、本質的な仮説を立てるにも重要な役割を果たすと考えられる。「ヌクレオソーム構造が DNA 変異の周期性を引き起こす要因となる」という新たな生物学的な発見等もあり、データベースの活用がされていると評価できる。

【創造的な生物・情報知識融合型の研究開発】

1. 「大規模な比較ゲノム研究を展開するためのワークベンチの構築/大規模比較ゲノムワークベンチの実践的応用に向けた研究開発」

内山 郁夫（自然科学研究機構基礎生物学研究所 助手/自然科学研究機構基礎生物学研究所 助教）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

オーソログ解析をするためのプログラム RECOG (Research Environment for Comparative Genomics) と、それを用いた微生物ゲノムのオーソログのデータベース MBGD (Microbial Genome Database for Comparative Analysis)を開発している。RECOG はサーバー構築の敷居が高く主に共同研究で活用されているが、MBGD は、月ごとに、約二千件程度の訪問者数があり、国際的な認知度もあると判断できる。論文引用も年間十数件あり、成果が活用されていることがわかる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

期間中に開始した RECOG を用いた共同研究を継続・発展させている。国内の共同研究のほか、MBGD/RECOG に関心を持つインドの研究者とは国際共同研究がスタートし、RECOG を一部使ったメタゲノムデータの新しい解析手法を開発するなど成果を出しており、今後も改良を行ってさらに発展させていただきたい。MBGD は研究課題終了後も更新と開発を続けており、JST バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) のライフサイエンスデータベース統合推進事業 統合化推進プログラムにおける微生物統合データベースの一部として、国内の他の微生物データベースとの統合に向けた開発も行っている。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

多様性を持つ微生物ゲノムの比較解析を行う上では、RECOG に代わるものではなく、分野への貢献は大きい。また、本研究で開発された比較ゲノム解析ツールは、微生物に特化したものではあるが、これを基礎にして色々なバイオインフォマティクスの展開が考えられると思われる。今後大量の微生物ゲノムが様々な形で解読されると考えられ、遺伝子の情報が得やすい微生物関連ゲノムの解析では系統分類学や微生物生態学、環境科学や医科学分野での利用価値は高く、今後おおいに波及効果を持つと期待できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

参加者の全体数が比較的少ない中、研究開発終了後、新たなポジションを得た者は6名おり、十分な人材育成が行われたと評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

本研究開発のような基盤技術としてのデータベースは、直接的な社会的、経済的な効果・効用が見にくいものがある。しかしながら、今後、微生物ゲノムが種々の方法で決定されてくれば需要が見込め、また、影響力も期待出来ると思われる。

ウ．総合評価

A) 活用がなされている。

本研究は、微生物ゲノムのオーソログ解析に特化したデータベース構築であり、この分野で同じ興味のある研究者に評価されるものとなっており、活用はされていると判断する。

2. 「タンパク質の構造・機能予測法の開発とヒトゲノム配列への適用/タンパク質の構造・機能・相互作用予測システムの開発と展開」

太田 元規（東京工業大学学術国際情報センター 助教授/名古屋大学大学院情報科学研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

ヒトゲノム配列からタンパク質の構造と機能を予測するシステムである SAHG (Structural Atlas of Human Proteins) に関し、公的研究機関・大学所属の研究者へ全予測立体構造モデルを送付したり、共同研究等が進められているなどの活用がされている。月別訪問者数はばらつきがあるものの千件以上を維持しており、また主要論文への引用回数は海外からも多く、国際的にも認知されているといえる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

複合体構造の比較法、立体構造変化の記述法、低分子リガンド結合予測の検証、NMR を利用した簡易な天然変性領域の同定法について BIRD 終了後も研究を進め、科学研究費補助金（新学術領域研究）「天然変性タンパク質の分子認識と機能発現」へと発展している。著名な専門雑誌への論文発表も継続しており、ワークショップ等でも紹介されるなど、国際的認知度は上がってきている。また、タンパク質と低分子リガンドとの相互作用の解析に SAHG が用いられており、国内でも創薬研究へと活用されつつあるため、今後に期待したい。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究により、タンパク質の立体構造、運動、機能の関連性分野で基礎的な研究が伸展した。例えば複合体の自動比較法、立体構造変化の階層的記述法、動的相互作用の解析法の方法論について作成した本研究のデータベース、システム等は構造バイオインフォマティクスの基礎研究の発展に貢献している。これらは今後増加が予想される複合体立体構造情報や発現情報を解析する際に威力を発揮すると期待できる。また、SAHG で提供しているリガンド結合のアニメーションは、結合部位や活性部位、リガンド情報とタンパク質の動きを一体として提供し、構造と機能のイメージを視覚的に把握しやすいため、生物学者がそこからヒントを得て新たに実験設計を行うことに貢献すると期待する。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は8名いた。また、ほとんどのメンバーが現在も研究に従事していることから、本研究は人材養成に大きく貢献したと評価する。

3) 社会的及び経済的な効果

ヒトプロテオームモデリングデータベースを利用した企業との研究が開始され、また、天然変性タンパク質の同定法から発展した生物特許の申請に向け、協議を開始している。創薬などの新たな応用研究につながる可能性もあり、SAHG の今後の可能性に期待したい。

ウ. 総合評価

A) 活用がなされている。

ヒトに関する網羅的データは利用価値が高く、BIRD 終了後も構造-機能に関する開発を進めている。国際的にも利用者が多く、今後の発展に期待したい。

3. 「脳スライス中で可視化した神経シナプスの自動解析」

川戸 佳（東京大学大学院総合文化研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

シナプスの変化を画像から自動で評価するソフトを開発した本研究は、これまで、時間や専門的な知識が必要であった作業を自動化し、個人の力量によらず、数値化による評価を可能にしたデータベースを開発した。米国での特許申請もあり、これまでにないアプローチで新規性のあるソフトが出来たと考えられる。海外からの利用申請もあり、さらに論文などで利用実績が報告されるなど、徐々にそのソフトの利便性・有用性が理解されつつあると考える。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

種々の研究機関でも使用実績があり、国内外の研究機関・研究所との共同研究も進んでいる。また、製薬企業などでの利用実績もあり、実用性の高いソフトが出来上がっていると思われる。薬品の作用効果による治療法の開発、薬理作用の検証等精神医学への貢献も拡大している。さらに、共焦点レーザー顕微鏡へ搭載により、精度向上と迅速化が試みられようとしている等、十分発展している。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究課題では、画像処理の技術により、構造的変化と生物現象との関係を結びつけることに成功した。大量のバイオイメーキングデータから生物学的に有用な情報を抽出する技術は大容量ビッグデータを扱う上で不可欠な技術であることから、本課題で開発した新規技術は、バイオインフォマティクス分野に大きく貢献すると期待される。さらに、新しい候補化合物のスクリーニングとして利用できる可能性があり、また、記憶のメカニズムに関連する遺伝子やファンクションの同定など、ライフサイエンス分野への貢献は様々考えられる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は4名いた。また、多くのメンバーが現在でも研究に携わっていることから、本研究課題は人材養成に貢献したと評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

本開発ソフトにより、専門的な知識のある研究者が手作業で行っていた作業が自動化された。さらに、熟練度や研究者によらず、公平な評価をもたらす意味でも評価できる。製薬会社などでの利用の報告があり、新しい薬の候補などのスクリーニングなどに利用されることが考えられ、実用性の高さ、自動化による人員・時間の削減などその効果は大きいと考えられる。国際的な共同研究も進み、米国の特許を獲得するなど、国際的な面での評価も高いと考えられる。創薬支援や神経疾患解明つなぐと期待されることから将来的に社会的、経済的に高い貢献をすると期待され、今後の展開が楽しみである。

ウ．総合評価

S) 十分な活用がなされている。

新しい手法を開発し、シナプスの変化を自動的に評価するソフトを開発した点は評価できる。開発したツールは、製品化したため非常に多くのユーザーに利用されるというわけではないが、将来的に重要な分野へ発展が期待される脳における神経ネットワーク形成研究分野で認識され、確実に利用者を増やしている。実際に、企業などでの利用実績もあり、その実用性の高さが伺える。

4. 「ヒト胚の形態発生に関する三次元データベース」

塩田 浩平（京都大学大学院医学研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

本研究開発は、ヒトの器官形成期胚について、発生段階ごとに、断層像および三次元画像のデータベースを構築したものであり、ヒトのデータとしては世界的にも珍しいデータベースになっている。訪問者数は年間で数百件程度で、多くのユーザーに利用されるといふよりは専門的な研究者のアクセスが多いものとなっているが、論文発表も国際的なものも含めて評価できるものであり、文献引用数も海外のものが多くあり、データベースとして、認知されていることが伺える。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

オーストラリアの研究者と共同研究を行い、本データベースの画像を含むヒト発生学 e-book を作成中であるなど、データベースの更なる活用が期待され、評価できる。データベースは現在もメンテナンスされ、引き続き、高解像度のイメージングデータをデータベースに加える予定であることも評価できる。標本コレクションの症例約 30,000 例について、観察記録、母親の妊娠歴や臨床データなどの書誌データをデータベース化し、画像データベースから各症例の書誌データにリンクできる体制となっており、今後の研究者の利用に対してシステムとしても発展し続けている。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究で開発されたデータベースは、イメージング発生学的データと遺伝子発現などのデータを統合して扱うような新しい分野へ大きく貢献した。データベースとしては、広く利用されているというよりは、専門家に利用されている印象があるものの、今後、様々なデータと合わせて解析することが予想される。また、本課題で構築したデータベースは、京都大学医学研究科附属先天異常標本解析センターに所蔵される世界最大のヒト胚標本コレクションの標本から器官形成期を中心としたヒト胚の画像ならびに各症例の臨床データを収集している。この中には、収集が困難な重要なデータが含まれており、診断・医療分野への産業展開に大きな波及効果をもたらすと期待され高く評価できる。本データベースは、ヒト胚のデータを収集している唯一のデータベースとして、発生における先天的な異常や、その異常に関連する生物学的な考察など、広く生物学的な目的で利用されると期待できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

一部の研究者や課題終了時の学生等の多くが、追跡調査時の所属不明になっており、評価が難しい部分もあるが、本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は5名おり、人材育成の面でも貢献したと評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

本データベースは、専門家向きへのデータベースであるが、今後、オーストラリアの機関と共同による本データベースの画像を含むヒト発生学の e-book の作成（2014 年完成予定）、「ヒト発生の 3 次元アトラス」（塩田浩平編、日本医事新報社）の刊行（2011 年）などの広報活動を行っており、基礎研究として社会的、経済的な効果・効用につながる兆しはあると考えられることから、さらに一般の研究者へのアクセスが広がることを期待する。社会的経済的効果が得られるのはまだかなり先のことだろうが、貴重なヒトのデータであり、様々な他のデータと合わせて解析することで、新しい方向性を生み出す可能性に期待する。

ウ. 総合評価

A) 活用がなされている。

これまで、マウスなどのモデル動物におけるこのようなデータベースは存在していたが、ヒトでの発生段階におけるデータは世界的にも珍しく、貴重なデータベースである。イメージングデータと遺伝子発現データなどを統合して解析するようなものになれば、バイオインフォマティクスの分野的にもまた、生物学的な分野においても非常に興味深い分野になる可能性があり、共同研究などを通じて、広く使われるようなデータベースになることが期待される。

5. 「実践による超分子複合体モデリングシステムの開発/実践による超分子ネットワークモデリングシステムの開発」

白井 剛（長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

PDB (Protein Data Bank) から分子構造および相互作用の情報を全自動で二次データベース化する SIRD (Structure Interaction Relational Database) システムを中核に開発が行われ、ツールのアクセス数は 300 件/月程度となっている。論文発表を行っており、また、海外からの引用数が多いことから、国際的にも評価されるものであると考えられる。なお、専門分野の研究者には、利用しやすいものであるが、専門分野以外の研究者でも簡単に利用できるようなものになると、より活用されるものと期待される。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

本研究開発における SIRD は完全自動化されたシステムで WEB 公開されており、創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業「創薬等支援技術基盤プラットフォーム」解析拠点、バイオインフォマティクス領域の課題「超分子モデリングパイプラインの構築」に発展しており、構造予測サービスを継続提供するとともに、9 件の共同研究が実施されているなど、十分に発展しているといえる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究開発は、世界的にも例を見ない、PDB データをもとに完全全自動で二次データベースを作成するツールであり、バイオインフォマティクスのユニークなリソースとして重要である。国内の創薬等支援技術基盤プラットフォームの一つとして採択されており、創薬において、有用なデータベースになると考えられる。PDB を全自動で、構造類似性・相互作用類似性に分類できるシステムは魅力的であり、データベースをさらに使いやすいものにするなどの改良をすることで、さらにライフサイエンス分野での活用が図られると考えられる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は 3 名いた。また、当時のメンバーの多くが研究に携わっている点も評価でき、本研究課題が、人材育成の面で貢献したと評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

現時点で具体的な応用研究の段階にはなっていないが、構造研究などでの利用も期待できるし、さらに、製薬会社で働く生物学者や薬理学者がデータベースに興味を持つことも想像でき、データベースのインターフェース等を工夫することで、さらに利用価値が高まることが期待される。

ウ. 総合評価

A) 活用がなされている。

タンパク質の複合体の分類などについて全自動でできるシステムを作っており、日本から発信していることは評価できる。なお、データベースのコンテンツは有用であることが伺えるが、専門分野以外の研究者の利用は容易でないと考えられるため、その点を考慮して、改善されることで、より一層の活用が期待される。

6. 「マウスを用いた脳機能表現型データベースの開発」

宮川 剛（京都大学大学院医学研究科 助教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

マウスの脳機能表現型データベースという非常にユニークな、また、網羅性が高いデータベースを構築した。コミュニティが限定されている印象はあるが同じ研究分野（神経科学者 SNS）においてよく認知されているデータベースとなっている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

課題終了後も、引き続きデータベースの運営、データベースの更新およびデータの追加が行われている。学内外の共同研究数も 60 を超え、成果が発展しているといえる。論文発表も数多く行われており、データベースが研究に大きく寄与している様子が伺える。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究の成果として、ゲノム情報やヒト脳機能に関するバイオインフォマティクス研究（ヒト脳のイメージングや、精神・神経疾患や認知機能等の人類遺伝学的研究、脳神経回路解析など）との連携、組織化が可能となり、マウス研究を起点として、ヒト脳機能の総合理解への新たな科学的展開が期待される。製薬会社などでの利用もすでに報告されており、多くの行動付きの脳のリソースというのは確実に有用なものになっていくと思われる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

技術補佐員等の多くが、追跡調査時において所属不明になっており、評価が難しい部分もあるが、本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は 1 名おり、人材育成の面での貢献をしたといえる。

3) 社会的及び経済的な効果

データベースの内容は非常に興味深く、行動評価と遺伝子発現や疾患関連遺伝子との関連性がデータベースで同時検索できるようになれば、さらに素晴らしいと考える。遺伝子改変マウスの網羅的行動テストバッテリーは創薬に応用されており、今後ますます利用価値が高まることか期待される。

ウ．総合評価

A) 活用がなされている。

データベースの利用は、若干限定的な印象を受けたが、コンテンツは非常にユニークなものであり、その有用性を広める努力が望まれる。モデルマウスについての表現型（行動）を精力的に研究しており、このようなアクティビティは、国際的な貢献が期待されるので、続けて研究を進めていくことを期待する。

7. 「予測技術を用いた生命システムの同定手法の開発」

石井 信（奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

本研究で開発された画像処理アルゴリズムである Edge Evolution Tracking は、広く利用されうる形で公開されているのではなく PLoS Computational Biology に情報学的手法が有効であることを示した論文への掲載のみである。実際には、ソフトウェアは出来ているようであるが、実際にどの程度利用されたかについては不明である。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

本課題の成果に関連する研究が文科省の脳神経科学や生命動態に関する競争的プロジェクト4件で展開されている。BIRD 終了後にも8件の論文が発表されており、研究開発成果が発展しているといえる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究開発は、発展の著しい光遺伝学によって生成されるハイスループットの計測データを処理するバイオインフォマティクス技術の先駆として貢献度が高いといえる。また、本手法を発展させ、4つの共同研究に至っており、インシュリンのシグナル伝達の研究などに用いられている実績や、神経細胞の形態変化の観測に用いられるなど、バイオサイエンス分野での貢献は評価できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は1名いた。参加メンバーは当時既に教授、助教等であり、キャリアアップした人数は少ないものの、人材育成の面で貢献したといえる。

3) 社会的及び経済的な効果

本研究は、情報科学的手法を実験との融合的なアプローチから展開する試みであり、手法が論文発表され、新しいアルゴリズムであることは評価できるが、そのような文献・アプローチは多くの報告があり、開発した手法自体がそのままの形で直接応用に発展することは期待できない。本研究開発によるソフトウェアなどが、社会的、経済的な効果・効用をもたらすには、さらなる取り組みが必要であると思われる。

ウ．総合評価

B) 活用がやや不足している。

論文発表は多く、実際の研究としては優れているが、開発手法自体の活用度はあまり高くないと思われる。実験系と情報系の研究者が密接に連携した点はモデルケースになり、個別解析の集積を期待する。BIRD 期間内の活動から、より汎用性の高いシステムの開発にチャレンジする方向性が生まれてきていてもよかったのではないかと判断する。

8. 「メタゲノムオーソログ遺伝子統合解析システムの開発/メタゲノム統合解析システムの開発」

黒川 颯 (奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科 助教授/東京工業大学大学院生命理工学研究科 教授)

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

開発したソフトウェアで 1,000 件の解析実績があり、データベースにおいては、約 1,000 件/月のアクセス数が有る。BIRD 研究開発期間終了後もデータベースは継承され、改良・発展している。MicrobeDB.jp (<http://microbedb.jp>) では、BIRD にて開発してきたすべての技術、データを継承し、ヒトのみならず自然環境のメタゲノムデータに対してもこれらの技術を応用している。被引用回数も 200 件を超える論文が複数あり、特に海外での引用や活用が顕著であることから活用状況は高く評価でき、ドイツのグループと共同でヒト腸内細菌叢の分類に関する概念を提唱するなど、今後の発展に期待が持てる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

MicrobeDB.jp は、JST バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) のライフサイエンスデータベース統合推進事業 統合化推進プログラムにより微生物データベースの統合化として継承され、RDF 化を含む改良によって進化している。ヒトメタゲノム DB はヒト腸内細菌叢に関する EMBL (European Molecular Biology Laboratory) との国際共同研究に利用され、本研究開発で作られたシステムはヒトメタゲノムデータ解析に特化していることが特徴となっていて、今後生産される大量のデータに対する解析で役に立つものとなりつつあると期待される。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

GPGPU (General-purpose computing on graphics processing units) を利用した超高速相同性検索ツール、スパコンによるメタゲノム解析手法、SINET (Science Information NETwork: <http://www.sinet.ad.jp/>) を利用した超高速データ転送技術開発などを開発し、従来困難とされた莫大な情報量となるメタゲノムデータの解析を種々のツールの開発により可能としたことはバイオインフォマティクス分野への大きな貢献である。また、BIRD の成果をもとにして Human MetaGenome Consortium JAPAN (HMGJ) が立ち上げられ、我が国におけるヒトメタゲノム解析の基盤を築いたことはライフサイエンス分野への大きな貢献といえる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

課題参加者は多くなかったが、本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は2名いた。大学院生も研究員として現在でも研究に携わっており、本課題が人材育成という面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

メタゲノムの研究は、地球上で繁栄している細菌叢の全てに適用可能性があり、健康産業、医療産業、食品産業、化学産業、農業などで、非常に重要な役針を果たすようになると考えられる。特にメタゲノム解析は今後の環境、医療の発展にとって重要であるためまた、今後の展開が期待される。

ウ. 総合評価

S) 十分な活用がなされている。

本課題で開発したメタゲノムデータ解析ツールおよびデータベースは国際的にも評価が高く、ヒトとの関わりも大きいことから今後ますますニーズが高まり社会的にも重要な貢献ができると期待される。

9. 「タンパク質化合物相互作用の網羅的予測手法とデータベースの開発」

榊原 康文（慶應義塾大学理工学部 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

開発されたタンパク質化合物相互作用予測システム COPICAT は、年間アクセス数が 20 万件を超えており、十分活用されていると判断出来る。創薬におけるリード化合物の探索空間を、従来のウェット実験プロトコルに比べて 1,000 倍近くエンハンスできたことなど、開発された技術は非常に有用なものと判断できる。ソフトウェアの利用例も多く、主要論文の引用分野も多岐にわたっている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

慶應義塾大学の医学部と共同で、消化器がんに対する抗がん剤の研究開発の実施や、科学研究費補助金やヒューマンサイエンス政策創薬総合研究事業において、ケミカルシャペロン法の候補低分子物質を効率的に選び出すために、COPICAT を応用した新技術開発に取り組んでいる。しかし、2013 年 5 月のサーバダウン、LinuxOS のバージョンアップに対応できないなどの理由で現在は COPICAT にアクセスできない状態になっていることは残念である。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

化合物の標的タンパク質の同定という問題に対し、網羅的インシリコ予測を組合せたまったく新しいプロトコルを提案し、バイオインフォマティクス分野に与えたインパクトは大きい。タンパク質と化合物の相互作用は基礎科学としての分子細胞生物学、応用分野としての医科学、創薬、環境科学等で重要な要素である。また、創薬研究以外でも、化学物質の安全性等の見地から、食品添加物や環境毒性評価等への適用可能性が示唆されておりライフサイエンス分野における貢献として新たな広がりを期待できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

当時の学生が現在でも研究に携わっている例は少ないが、本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は 2 名おり、人材育成の面で貢献をしていると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

本課題が開発した COPICAT を用いた研究は、抗がん剤の共同研究、感染症原因菌の阻害活性物質の探索に利用されており、医科学・創薬分野での利用増加が期待され、今後も波及効果が大きいと見込まれる。

ウ．総合評価

A) 活用がなされている

本課題はタンパク質と化合物の相互作用の網羅的スクリーニングを可能にするハイスループットなツールを開発し、今後の基礎と応用の両面でニーズが高まると期待される。しかしながら、論文発表の遅れ、継続公開の停止などは普及の障害となっており、共同研究も想定されるニーズに比して限定的となっていることは残念である。

10. 「高精度タンパク質間相互作用予測システムの開発」

清水 謙多郎（東京大学大学院農学生命科学研究科 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

タンパク質の相互作用に関する予測ツールや関連データベースを構築し、データベースについてはコンテンツを現在も更新し、維持しているが、開発されたツールへは現在アクセスできない状態となっており残念である。本研究後も論文発表を続けて行っている点は評価できる。アクセス数が、年間で約 5,000 件程度と利用者数が少ない印象があるが、もう少し幅広く利用者が使える形になればさらに活用されると思われる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

課題終了後も 10 報ほどの論文発表を行い、引き続きデータベースや予測精度の改善を試みている。食品会社との共同研究を行い、タンパク質の結合のみでなく、結合部位まで考察している点は、データベースの質の高さと・実用性が伺えて評価できる。類似のアプローチで開発されたシステムの中では、世界最高の予測精度を達成していると CASP9 において評価されるなど、世界的な評価が得られている。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

タンパク質相互作用予測のおよそすべてのジャンルで新規の手法を開発し、従来よりも高い予測精度を達成している。開発された分子シミュレーションに関する基盤技術は、広くバイオインフォマティクス分野に役立つものとなっている。また、本課題で開発した分子シミュレーションに関する基盤技術は、広く生体分子のシミュレーション関連のインフォマティクスに役立ち、有用性が高いと考えられる。さらに、既に実施されている食品、製薬会社との共同研究が実施されているが、今後も広く利用される可能性があり、創薬・医療の分野への貢献が期待できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は 6 名おり、人材育成の面で貢献したといえる。

3) 社会的及び経済的な効果

食品会社との共同研究や、企業とアミノ酸変異により水酸化酵素の活性を高める研究を行い、実用化に結びつく成果を得ている。重要なツールであることは明らかなので、今後は、新規医薬品の開発、疾患発症の分子機構の解明その治療法の開発などの医療分野への応用や、食品や環境分野などへの適用拡大の可能性も考えられる。

ウ．総合評価

A) 活用がなされている。

構築したシステムの精度の高さと、食品・製薬会社での利用可能性は評価できる。一方で、データベースの利用数などは少ない状況であり、利便性の向上がみられれば、さらに広まるように考えられるため、今後の発展を期待する。

11. 「転写制御領域の構築原理解明」

中井 謙太（東京大学医科学研究所 教授）

研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

様々な生物種のゲノム塩基配列における遺伝子の転写制御情報に関するデータベース、ツールを開発した。研究期間終了後も数多くの論文を発表し、引用文献数も多いことから、データベースが広く認知されており、また、Nucleic Acid Researchのデータベース特集号で取り上げられるなど、国際的にも認知されたデータベースであることが伺える。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

課題終了後も、データベースは維持され発展している。本研究のデータベースが利用され、国際的な共同研究に発展した例がいくつかあり、データベースを研究の基盤に置いた研究で学術的に価値ある知見が得られている。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本研究で開発・改良されたデータベースは、転写制御データの基本データベースとして構築されており、複数の生物種について網羅的にデータを収集していることから、バイオインフォマティクスや転写制御関連のライフサイエンス研究に対し、有用な基盤を提供している。このことは、ゲノム研究分野の有力誌、Nucleic Acid Researchのデータベース特集には、本課題で改良されたデータベースの紹介記事が複数回掲載されていることからわかる。また、ゲノム塩基配列から制御情報を、どこまでどのようにして読み解くかということは、生命科学の中心課題の一つであるが、特に各種生物の転写開始点と上流制御領域を収集した DBTSS(Database of Transcription Start Sites)は、ライフサイエンス分野の研究者が研究を進める上での重要なリソースとして利用することが期待できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は9名おり、人材養成の面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

現時点では企業等との連携研究は無いが、本研究の過程で改良された転写発現データの基本データベースは、国内外の多く研究者に利用され、バイオインフォマティクスやライフサイエンス研究における有用な基盤となっている。特に DBTSS は、酵素や薬剤の設計による新規医薬品の開発や、疾患発症の分子機構の解明や治療法の開発などの医療分野への応用などの多大な貢献があるものと期待される。

ウ．総合評価

S) 十分な活用がなされている。

バイオインフォマティクス分野だけでなくライフサイエンス全般に、影響力のあるデータベースであり、その成果も十分にある。国内外で多くの研究者に利用、認知されており、また、制御因子のゲノムレベルの研究は、これからますます重要になっていくと思われる。アクティビティをさらに高めて、国際的に貢献を期待したい。

12. 「酵素反応分類に基づく酵素反応予測システムの開発」

長野 希美（産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター 主任研究員）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

中心となるデータベース EzCatDB (Enzyme Catalytic Mechanisms : 酵素触媒機構データベース) は本課題開始前に開発されており、BIRD ではその検索システムである EzCat-BLAST と EzMetAct を開発したが、それらは公開されていない。(※)

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

研究代表者の論文発表は行われており、研究開発は進められていることが分るが、研究成果の活用に関しては EzCat-BLAST と EzMetAct の公開が期待されている段階である。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

様々なアルゴリズムを新しく考案し、これまでの予測結果を上回っている点は評価できる。また、タンパク質立体構造データの機能解析への応用など将来的には活用が期待されるデータベースと考えられる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は3名おり、人材育成の面で貢献しているといえる。

3) 社会的及び経済的な効果

現時点で応用に向けて発展した例はないが、酵素反応は生命現象の要であることから医学・創薬への利用を通して社会的、経済的な効果をもたらすことは期待でき、データベースが公開されれば、他分野への応用も広がるのではないかと期待する。

ウ. 総合評価

B) 活用がやや不足している。

BIRD で開発した成果が公開されていないことが大きな問題である。できるだけ速やかに公開することにより、今後の活用を期待したい。

(※) EzCat-BLAST (<http://ezcatdb.cbrc.jp/EzCat-BLAST/index>) , EzMetAct (<http://ezcatdb.cbrc.jp/EzMetAct/>) は、調査時点では公開されていなかったが、2014年10月に公開された。

13. 「進化型計算と自己組織化による適応的画像分類法の開発」

馳澤 盛一郎(東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

開発した4つのツールを公開しているサイトには年間数百～数千件のアクセスがある。民間企業や、研究機関等によるツールの活用事例もあり、主要論文の被引用回数も高いことから、活用がされているといえる。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

課題終了後は JST 先端計測分析技術・機器開発プログラム「生物画像のオーダーメイド分類ソフトウェアの開発」にて研究開発が継続されている。課題終了後の発表論文は非常に多く、精度、速度、効率、汎用性の改善に取り組むとともに、国内外で共同研究を実施している。半教師付き学習アルゴリズムの改良版 CARTA は Nature Communications で発表され、国際的に関心を持たれている。より汎用性の高いソフトになっており、実際に官民で使用されている実績もある。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

今日のライフサイエンスでは大量の画像が生産され、処理のためにインフォマティクスが不可欠となっている。本課題はその状況を早期に予測して研究開発を行い、ツールを提供するとともにバイオイメージインフォマティクスという新たな領域の開拓を進めることとなった。応用範囲が広がっており、基礎生物学のみならず、医学、薬学分野にも活用例が有る。バイオイメージングはライフサイエンスのほぼすべての分野で必須な手法となっており、本課題で開発した画像処理ツールの当該分野への貢献は将来にわたって極めて高いと期待される。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題に参加した者で、その後新たなポジションを得た者は4名いた。参加人数が全体として多くないことを考慮すると、本課題が人材育成という面で貢献したと評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

科学機器メーカーがライセンス契約して開発を進めている。また、大学、研究機関において14件の応用に向けた共同研究が進行中で、医学、農学など広い分野への展開があり、社会的及び経済的な効果がすでにみられている。生物医学画像分類ソフトウェア「CARTA」の開発へと発展しており、将来的には日本の医療・臨床現場に活かすことも可能

な段階であるため、今後の発展が大いに期待される。

ウ．総合評価

A) 活用がなされている。

バイオイメージングデータの高速処理は基礎と応用の諸分野で今後ますます必要性が高まると見込まれる。その状況を早期に予測してバイオインフォマティクスによるツールを開発・公開したことにより、すでに多くの活用例がある。本研究開発の流れで生物医学画像の分類ソフトウェア「CARTA」が開発されていて、今後の活用はさらに高まると期待される。

14. 「生命科学上の非構造化データの統合マイニング」

馬見塚 拓（京都大学化学研究所 教授）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

BIRD 期間中に構築した遺伝子発現データと代謝ネットワークデータの両者から、「分類」と「クラスタリング」を行うソフトウェアをさらに改良して発表する等、適宜ブラッシュアップを行っている。論文による紹介例はあるが、第三者による活用事例は挙げられておらず、これらのツールの利用数は不明である。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

BIRD 終了後もツールの改良と実データへの適用により多くの論文を発表している。今後の生命科学分野での非構造化データの増加により、この手の情報を handling できる当ソフトの存在は重要であると考えられる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

非構造化データの統合マイニング既存技術の単純な適用ではなく、高効率・高性能な新しい手法を構築しており、技術的なブレークスルーを生み出したという意味で、バイオインフォマティクスへの貢献度が高い。機械学習・データマイニング分野、さらに、より一般的に情報科学、計算機科学の発展にも貢献しており、本課題で開発した手法を実際に応用することで、さらに多くの分野への貢献が期待できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

本研究開発課題終了後に、新たなポジションを得た者は6名いた。参加人数が全体としてさほど多くないことを考慮すると、本課題が人材育成という面で貢献していると評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

課題終了後からあまり時間がたっていないこともあり、社会的及び経済的な効果は特に得られていないが、本課題が開発したツールや基盤技術は多くのソフトウェアに繋がっており、ライフサイエンスやインフォマティクスの問題解決に貢献すると期待される

ウ．総合評価

B) 活用がやや不足している。

本課題がターゲットとした非構造化データの統合的マイニングは極めてユニークであり、将来的にはニーズが高まることは十分期待される。その意味で長い目で見た判断が必要と思われるが、少なくともこれまでの段階では当該研究グループ以外での活用例が少ない。情報科学の基盤として社会的、経済的問題にも適用可能と考えられるので積極的に成果を発信して共同研究を含む活用の道を開くことが期待される。

15. 「ダイナミクスを考慮した膜蛋白質の構造モデリング法の開発」

水口 賢司（医薬基盤研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト
プロジェクトリーダー）

ア. 研究開発による成果の活用状況や発展状況に関する評価

1) 構築されたデータベースの機能や開発された技術等の活用状況

膜タンパク質の立体構造の特徴を捉える本データベースが、創薬ターゲットの探索手法の開発につながっている。データベースは完全な形で公開されるには至っておらず、MultiCoMP (Multiple Conformations of Membrane Proteins) は、過去無料で公開されていたが、現在は技術的理由により、一部機能が使えない状態となっている。現在も公開中の HTM-ONE については、数百件/月のアクセス数となっている。

2) 課題終了後の研究開発の継続状況、研究開発による成果の発展状況

海外研究機関との共同研究や、JST バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) との共同研究につながり、本課題が広がりを見せている様子が伺え、評価できる。本課題で作成したデータベースは、単独では、データベース公開などの点から見ると不完全であるが、他のデータとの統合で、創薬におけるアプリケーションに取り入れられる様子が見られ、本研究が、医学・医療の現場で応用されつつある点は評価できる。また、本課題中のデータ統合やデータベース開発の試みは幅広く発展した。データ統合に関しては、JST NBDC と共同し、生命医科学データベースの横断検索システムの開発・公開や、セマンティックウェブ技術を用いたデータ統合システムの開発につながった。とくに EBI 等と連携して医薬品候補の安全性評価データベース開発へ進展したことは評価できる。

イ. 研究開発による成果の科学技術的、社会的及び経済的な効果に関する評価

1) バイオインフォマティクス分野及びライフサイエンス分野の研究への貢献

本課題のデータベースは、単独でのサイトは完全ではないものの、共同研究の機会を使い、他のデータベースと統合して使う環境を構築しつつある。データ統合やデータベース開発は、バイオインフォマティクス研究の最も重要な要素の一つであり、様々なデータベースと統合することで、バイオインフォマティクス全体の利用促進につながりつつある点は、評価できる。また、本データベースを、様々な他のデータベースと統合して利用する機会を創出する活動が見られ、特に創薬におけるアプローチが見られるなど、ライフサイエンスの分野での貢献が期待できる。膜タンパクは創薬ターゲットとしても注目を集めている分野であり、新たなデータベースや解析ツールを得ることで、新規創薬ターゲットの発見に繋がることが期待され、評価できる。

2) 新しい分野の人材育成の面での貢献

2人の研究者が本研究を通じて更なるキャリアアップに繋がっている点は、評価できる。

3) 社会的及び経済的な効果

本課題で構築されたデータベースは、単独では、GPCRなどの膜タンパクの立体構造の特徴を提供するものであり、それ自体、有用であると考えられるが、他のデータベースと統合的に利用されることで、その利用価値はさらに高まると考えられる、そのような機会を創出し、創薬などの実用化に向かって進んでいる点は、本課題が社会的にも貢献できるものと期待できる。また、本課題の直接の対象としては挙げていないが、本課題終了後に開発したTargetMineは創薬ターゲットの評価を目指した統合データウェアハウスであり、企業とのライセンス契約が成立し、商用版の販売を開始した。

ウ. 総合評価

A) 活用がなされている。

課題自体は、全てのシステム公開に至っておらず、評価が難しいところであるが、様々なデータベースと統合して、データベースを公開・運用する機会を創出し、利用できる形となっている。データベース自体も特徴のある・有用性の高いものだと考えられるが、統合データベースの一つとして利用できる形にするなど、広く使われるような環境づくりが見られた点は評価できる。