

Title	試行錯誤的なユーザーインタラクションを考慮した創薬シミュレーション支援システムに関する研究
Author(s)	前野, 隆志
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/47262">https://hdl.handle.net/11094/47262</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	まえのたかし 前野隆志
博士の専攻分野の名称	博士（情報科学）
学位記番号	第 21322 号
学位授与年月日	平成 19 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 情報科学研究科マルチメディア工学専攻
学位論文名	試行錯誤的なユーザインタラクションを考慮した創薬シミュレーション支援システムに関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 下條 真司  (副査) 教授 岸野 文郎 教授 薦田 憲久 教授 西尾章治郎 教授 藤原 融 特任助教授 伊達 進

### 論文内容の要旨

生体の機能解析や自然現象解明のために計算機を利用したシミュレーションは、ますます盛んになってきている。特に、創薬の研究分野においては時間的、費用的な観点からコスト削減に対する要求が高く、従来実験室で行われていた実験を計算機上で行う試みが積極的に行われている。今日プログラム実行が効率化されている一方で、研究者が判断を繰り返して実行する試行錯誤的な要素を含んだシミュレーションでは、システム利用者である研究者の作業がボトルネックとなっている現状が存在する。高速化が難しい利用者の判断（ユーザインタラクション）を含んだ試行錯誤的なシミュレーションを支援する、新しいメカニズムが求められている。

本論文は全 5 章で構成される。まず第 1 章では、創薬における計算機の利用と本研究の対象となるドッキングシミュレーションの位置づけを述べる。また、試行錯誤的なユーザインタラクションを含むシミュレーションにおいては、シミュレーション実行の単純な効率化だけでなく、システム利用者である研究者の作業の効率化を図ることが重要であることに言及し、本研究の意義について説明する。

第 2 章では、創薬アプリケーションの 1 つであるドッキングシミュレーションに焦点を当て、その中のパラメータ調整過程において試行錯誤的なユーザインタラクションが原因で全体のスループットを低下させている現状の問題を取り上げる。この問題の解決のために、本研究で取り組むべき 2 つの課題を導き出す。

第 3 章では、第 1 の課題である「試行錯誤の手順のデータ構造化」について述べる。試行錯誤の繰り返しのたびに変化する研究者の思考単位でのシミュレーション実施手順のまとまりを「試行セット」のモデルとして設定し、データ構造化に必要な項目を導く。その後、リレーショナルデータベースを利用して試行セットモデルに対するデータ構造化を実現する。それにより実行システムは、研究者の考える一連の手順のまとまりをデータとして利用することができる。

第 4 章では、第 2 の課題である「試行錯誤的な手順の実行環境」について述べる。試行セットとして定義された概念的な実施手順がシームレスに実行される環境の必要性を述べた後、概念レベルと具体レベルでのツール実行を階層別に管理するシステムを提案・構築する。その後、試行セットがシームレスに実行できることを示すとともに、ドッキングシミュレーションでのパラメータ調整の実例を用いてその有効性について考察する。

最後に第5章において、第3章、第4章での課題の達成により、創薬シミュレーションにおける試行錯誤的な手順を支援するシステムが実現できたことを示して本論文をまとめ、今後の課題について検討する。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、創薬分野での重要な位置づけを占めるドッキングシミュレーションにおける非効率なパラメータ調整過程に着目し、試行錯誤的なユーザインタラクションを効率化する創薬シミュレーション支援システムに関する研究成果をまとめたものである。その主要な成果は以下の3点に要約される。

(1)創薬研究で利用されるドッキングシミュレーションには、利用するツール群のパラメータ調整を行うパラメータ調整過程と、多数の化合物との結合シミュレーションを行うことで化合物を振り分けるスクリーニング過程が存在する。本論文では、近年研究開発が活発に行われているスクリーニング過程だけではなく、研究者によって試行錯誤的に行われるパラメータ調整過程にも情報技術による効率化が不可欠であることを指摘している。また、今日試みられているスクリプトやポータルといった既存情報技術を用いた解決アプローチの問題点を述べ、試行錯誤的なパラメータ調整過程の効率化のための技術的課題を明確にしている。

(2)ドッキングシミュレーションのスクリーニング過程に着目した、大量の計算ジョブを複数台の計算機に分散し高速に処理する情報技術は今日数多く利用可能である一方、パラメータ調整過程においては研究者が行う試行錯誤的なツールやパラメータの選定・設定を効率的に管理できる情報技術は存在していない。本論文は、この問題点に着目し、研究者が行う試行錯誤的なツール・パラメータの選定・設定を柔軟な階層構造で表現できる「試行セット」と呼ばれるモデルを提案している。さらに、そのモデルをリレーショナルデータベースによる実際のデータ構造として実現できることを示している。

(3)研究者の試行錯誤を実際環境上で効率的に支援するためには、前項のデータ構造で保持される試行錯誤的なツール・パラメータの選定・設定の情報を基に、それをシームレスに実行環境で実施できる必要がある。本論文では、前項のデータ構造、すなわち試行セットを効率よく処理するために Presentation 層、PSE 層、および Grid 層から成る3階層の構造を持たせたシステムアーキテクチャを提案・実装している。さらに、ドッキングシミュレーションを用いた実際のパラメータ調整例を通じて、システムの実用的な観点からの有効性を示している。

以上のように、本論文は効率的な創薬シミュレーション実施を実現する上で、上記3点の主要成果を含む多くの有用な研究成果をあげており、マルチメディア工学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士（情報科学）の学位論文として価値あるものと認める。