

神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」 2018 年度報告

鈴木洋介¹⁾, 渡邊博文¹⁾, 石野麻由子¹⁾, 土井陽子²⁾, 倉仁美¹⁾, 江口至洋³⁾,
田中成典¹⁾, 鶴田宏樹³⁾, 白井剛⁴⁾, 森一郎⁵⁾, 伊藤真里⁶⁾, 臼井英之¹⁾, 横川三津夫¹⁾

- 1) 神戸大学計算科学教育センター
 - 2) 理化学研究所生命機能科学研究センター
 - 3) 神戸大学学術・産業イノベーション創造本部
 - 4) 長浜バイオ大学バイオサイエンス学部
 - 5) 神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科
 - 6) 医薬基盤・健康・栄養研究所バイオインフォマティクスプロジェクト
- suzuki@ferret.kobe-u.ac.jp

Annual Report on Interactive Distance Learning “Introduction to Computational Life Science” Broadcasted from Kobe

Yosuke Suzuki¹⁾, Hirofumi Watanabe¹⁾, Mayuko Ishino¹⁾, Yoko Doi²⁾, Hitomi Kura¹⁾
Yukihiro Eguchi³⁾, Shigenori Tanaka¹⁾, Hiroki Tsuruta³⁾, Tsuyoshi Shirai⁴⁾,
Ichiro Mori⁵⁾, Mari Ito⁶⁾, Hideyuki Usui¹⁾, Mitsuo Yokokawa¹⁾

- 1) Education Center on Computational Science and Engineering, Kobe University
- 2) Center for Biosystems Dynamics Research, RIKEN
- 3) Office for Academic and Industrial Innovation, Kobe University
- 4) Department of Bioscience, Nagahama Institute of Bio-Science and Technology
- 5) Graduate School of Science, Technology and Innovation, Kobe University
- 6) Laboratory of Bioinformatics, National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

概要

生物の大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と、それに促されたシミュレーション科学, 人工知能, データサイエンスなどの研究分野の進展やそれらの綿密な連携により, コンピュータを活用した計算生命科学の研究分野は, 今日, 急速に変革を遂げつつある。計算生命科学は, 計算科学と農工工学分野が融合した学際的研究領域であり, 今後, 様々な研究分野や産業界等への研究の拡がり期待されているため, 包括的な基礎知識を習得する機会が求められている。神戸大学計算科学教育センターは, 関係諸機関と協力して, 遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」シリーズを2014年から全国に配信を開始し, 2018年度は748名の受講登録を受け付けた。本稿では, 2018年度に実施した「計算生命科学の基礎 V」と, 最近注目されているディープラーニングに焦点を当て特別編として実施した「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル 2」の開催結果について報告する。

1 はじめに

現代の生命科学は, 急速な変革を遂げつつある。その変革は, 生物のゲノム情報, RNA 配列情報, タンパク質構造などの大規模データ(ビッグデータ)の蓄積と, シミュレーション科学, 人工知能, データサイエンスなどの研究分野の進展, 及びそれらの連携を促しているスーパーコンピュータを活用した「計算生命科学」の大きな進展に依るところが大きい。計算生命科学は, ゲノムの遺伝情報, 生体分子の立体構造と相互作用, 細胞レベルの代謝・

生理や疾患までの高次生命活動の高階層のビッグデータを定量的かつシステムティックに解析し, 計算機シミュレーションにより予測し, それらを統合することにより生命を理解することを目指す学問分野である。その急速な進展は農学や医学の分野にも大きな影響を及ぼし, 創薬や有用物質の生産やゲノム医療などへの応用が期待されており, アカデミアだけでなく産業界からも大きな注目を集めている。

しかし, この研究分野は急速に進展しているため, 網羅的に最先端の研究の現状を把握する場や, 研究分

野全体を俯瞰する機会が無かった。このため、神戸大学計算科学教育センター(ECCSE)、神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科、理化学研究所生命機能科学研究センター ポスト「京」重点課題 1[1]、理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)などの共催により、この研究領域の第一線で活躍されている著名な研究者の方々によるインターネットを利用した遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」シリーズを、2014年から開講し、インターネットで配信している[2]。過去5回のシリーズでは、生命科学のデータベース、統計学、バイオインフォマティクス、およびシミュレーション科学と多岐に亘る講義を配信し、計算生命科学の現状を知る良い機会であるとの評価を頂いた。詳しくは開催報告書[3,4]を参照して欲しい。また、本遠隔講義に関する取り組みについては、大学ICT推進協議会2017年度年次大会、2018年度年次大会で報告したところである[5,6]。

本稿では2018年度に実施した「計算生命科学の基礎 V」と、ディープラーニングに焦点を当てた特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」の開催結果について報告する。

なお、6年目となる今年度もデータサイエンスに関わる講義を拡充させ、2019年10月より遠隔講義配信を開始した [7]。

2 講義概要

本遠隔インタラクティブ講義は、10月から1月までの期間、毎週同じ曜日(2014年度、2016年度は火曜日、2015年度、2017年度、2018年度は水曜日)の17:00-18:30の90分間、インターネットを使った配信により、計15回の講義を提供した。配信環境としては500台の端末(PCもしくはスマートフォン)まで同時配信可能なCisco社のWebex Events Event 500を用いている。これは主催側PCから講義の模様を映像や音声により受講者のPCへ配信し、さらに講義用スライド画面を受講者のPCからも共有することができるシステムである。受講者は主催者から送られるURLにWebブラウザを用いてアクセスすることによって受講できる。おおむね安定して講義の配信を行うことができている。

受講者側PCからは、Webexのチャット機能により講義に対する質問などを主催者側PCに送ることが可能であり、この機能を利用して講義終了時に質疑応答の時間を設けている。さらに一部の講義については、その模様をアーカイブ化した映像を、R-CCSのWebサイトで公開している[8]。

受講者の募集は、ポスターやチラシの配布、学会のメーリングリスト、過去の受講者へ呼びかけ、共催組織のWeb siteなどで行った。受講申込は、ECCSEのWebサイトの登録用フォームから行えるようにした。

3 2018年度「計算生命科学の基礎 V」

5年目となる2018年度は、2018年10月3日から2019年1月23日にかけて15回実施した。受講登録者は748名となり過去最多を更新した(1年目262名、2年目464名、3年目550名、4年目612名)。本講義について、より広く知られてきた結果であると考えている。

15回の講義は、「ゲノムから分子構造までの計算生命科学の基礎と実践」、「構造生命科学のための分子シミュレーション」、「健康科学・医療・創薬への応用」の三編構成とした。また、最新の話題である人工知能関連の話題やデータサイエンスの話題を取り入れた。各回の実際の受講者数も人工知能関連の講義では比較的多かった。

受講登録者の所属は図1のとおりである。企業関係者が半分以上を占めている。この傾向は昨年度までと同様である。企業が求めていることとも、講義の内容がマッチングしているためと考えられる。

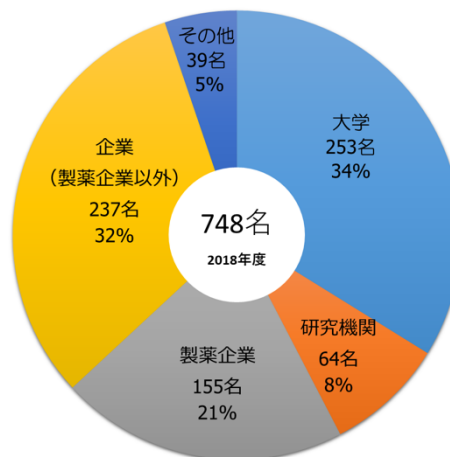


図1 2018年度「計算生命科学の基礎 V」受講登録者の所属分布

次に、大学関係者の全国分布を図2に示す。全国の31都道府県の72大学から253名の受講者の登録があった。



図2 2018年度「計算生命科学の基礎 V」の大学所属の受講登録者の全国的な広がり
 (https://d-maps.com/carte.php?num_car=24851&lang=ja をもとに作成)

図3に、各講義の聴講申込数と実際に聴講した数を示す。企業関係の申込者が多いため、配信時には用務を優先される者が多かったものと考えられる。最大同時受講者数は第3回目の288名であった。

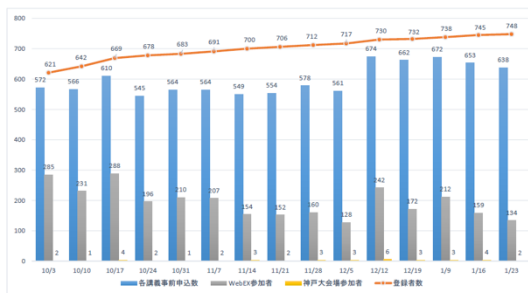
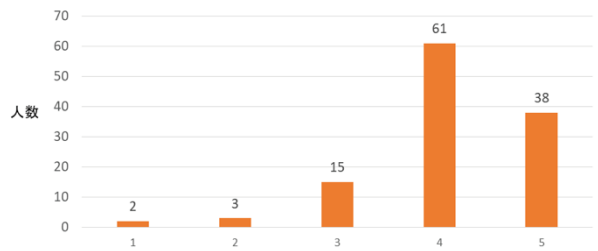


図3 各講義の聴講申込数と実際の聴講者数

最後に、受講者の受講後の評価について述べる。受講後、Web、またはメールを介してアンケートを行った結果、受講登録者748名中119名の回答を得た。全体的な評価については、1を「期待はずれだった」、5を「とても良かった」として1から5の5段階で評価してもらった。「良かった」、「とても良かった」の割合が83%と大変高い評価が得られた(図4)。



1 期待外れ → 5 とても良かった

図4 2018年度「計算生命科学の基礎 V」遠隔講義全体の評価(アンケート結果):5を最高、1を最低とした5段階評価

講義全体への感想は以下の通りである。

- 統計、データ分析関連の知識がまとめて勉強できる場だったのでとてもありがたい。
- 遠隔で行っている講義が少ない中、このような遠隔地で受講できるようになれば、年齢、地域、その他の事情に左右されない教育の普及につながりそうに感じた。
- 最新の分子シミュレーションの手法について知ることが出来た。
- 総論から専門分野に至る過程を話して頂いた講義は非常に分かりやすかった。

講義を知人にも勧めたいという声も多くあった。実際、アンケートで受講のきっかけを聞いたところ、知人からの紹介でこの講義を知ったという回答が約20%となっている。

一方で、映像や音声トラブルや、インストール時のトラブルに関する指摘もあった。配信トラブルについては、配信場所(ECCSE)から各個人のPC環境へのネットワーク接続速度の影響が大いに考えられ、やむを得ないかもしれないが、今後も改善できるよう努力したい。

5 特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」

AIやディープラーニング、機械学習といった手法が今、大きな注目を浴びており、計算生命科学分野においても例外ではなく、講義だけではなく、実際にPCを用いて体験したいという要望があった。

2017年に引き続き、主として初心者向けに生命科学におけるディープラーニングをテーマにした特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」を実施した。特別編の構成は、講義「生命科学分野における深層学習技術」(90分)と、実習「Python + TensorFlowによる学習」の2部構成である。講義では、化合物構造グラフを扱うGraph convolution技術やタンパク質立体構造を扱う3次元畳み込みネットワークなど、創薬応用を中心と

した生命科学分野向けの最新の深層学習技術に関する解説が行われた。実習では、AI分野で良く用いられるPythonとTensorFlowを取り上げ、ニューラルネットワークによる予測モデルの作成を実際に行ってみた。ケムインフォマティクス分野では、フィンガープリントを用いた化合物の薬物動態パラメータに対する予測モデルの作成や、バイオインフォマティクス分野ではペプチドの2次構造予測の初歩的な問題に取り組んだ。

終了後のアンケートでは、おおむね良好な回答が多かった。特に実習に関しては、「ディープラーニングの基礎と仕組みが分かった」、「深層学習を行える環境を自分のPCに整備できたことは、大変助かった」などの意見を頂いた。

受講の募集は、遠隔インタラクティブ講義の募集とは別に行っており、ポスターやチラシによる案内はなく、メーリングリストやWebサイトによるものだけで行った。申し込みの期間も通常編よりは短かったが、特別編への関心は高く、全体で246名の申し込みがあった。実習は先着で申し込みを締め切り19名で実施した。講義は従来通りWebexを用いたインターネット配信を行ったが、実習の配信は行わず、受講者に会場に来ていただいて実施した。

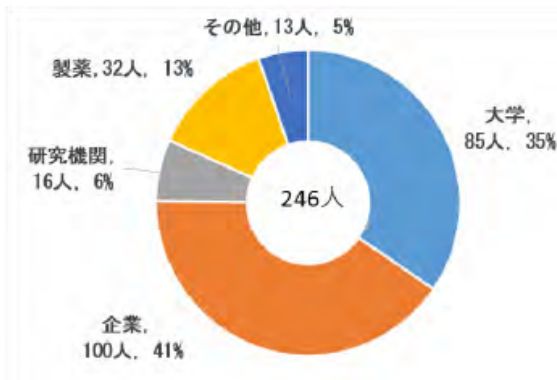


図5 2018年度「特別編」講義受講者の所属分布

受講者の所属を見ると、例年の遠隔講義とあまり変わらない構成だった(図5)。

6 まとめ

本報告では、2018年度に実施した遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎V」及び特別編「生命科学のためのディープラーニングチュートリアル2」の実施状況についてまとめた。これまでの5年間分の講義及び特別編を合わせると延べ3000名の受講者登録があり、その講義内容については、多くの受講者から高い評価を頂いている。

2019年10月2日からは、計算生命科学の基礎VIを実施しているが、2020年度以降は、継続的な運営のための資金確保や運営体制など解決しなければならないいくつかの課題がある。

これまで遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」で対象としている分野は、現在も急速に発展し続けており、よりニーズの高い取り組みを紹介していただいているという産業界からの期待も大きい。

このような期待に応えらえるよう2020年度以降も継続の努力を続けていく。

謝辞

本遠隔講義の実施に当たっては、多くの方々にご協力頂いた。また、兵庫県及び神戸市の研究教育拠点(COE)形成推進事業の一環として理化学研究所計算科学研究センターの人材育成事業の支援を頂いている。ここに記して感謝申し上げます。

参考文献

- [1] ポスト「京」重点課題1サイト
<http://scidd.riken.jp/>
- [2] 遠隔講義一覧
http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/
- [3] 神戸大学計算科学教育センター編「開催報告書：遠隔インタラクティブ講義 計算生命科学の基礎 2014年度・2015年度・2016年度, 2017.
<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/news/1985>
- [4] 神戸大学計算科学教育センター編「開催報告書：遠隔インタラクティブ講義 計算生命科学の基礎 2017年度・2018年度, 2019.
<http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/news/content.html>
- [5] 渡邊博文, 鈴木洋介, 近藤洋隆, 石野麻由子, 土井陽子, 江口至洋, 田中成典, 鶴田宏樹, 白井剛, 森一郎, 臼井英之, 横川三津夫, 神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」, 大学ICT推進協議会 2017年度年次大会論文集, TF1-2, 2017.
- [6] 鈴木洋介, 渡邊博文, 八木学, 石野麻由子, 土井陽子, 江口至洋, 田中成典, 鶴田宏樹, 白井剛, 森一郎, 臼井英之, 横川三津夫, 神戸から配信する遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」の2017年度報告, 大学ICT推進協議会 2018年度年次大会論文集, MB1-3, 2018.
- [7] 「計算生命科学の基礎VI」受講申込サイト
http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science6/
- [8] 「計算生命科学の基礎V」理研eラーニングアーカイブサイト
http://www.r-ccs.riken.jp/jp/course/course-base_2018