

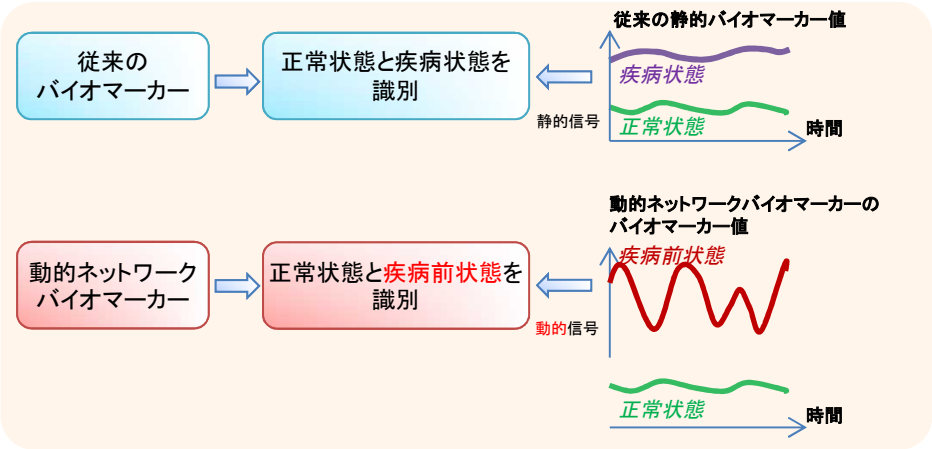
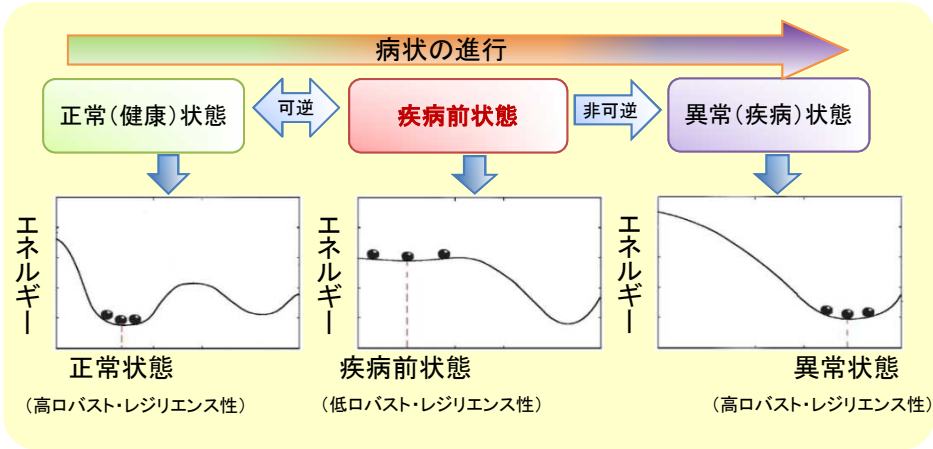
数学・数理科学の活用により進展した事例

超早期診断・治療を可能にする 動的ネットワークバイオマーカー

1. 課題: 前立腺がんのPSAのような単独で鋭敏なバイオマーカーの発見は容易ではない。また、従来のバイオマーカーは病気を検知するもので、**疾病前状態(病態悪化の予兆)を検出可能なバイオマーカーは未発見。**

2-1. 数学的手法・理論: 分岐理論、複雑ネットワーク理論、非線形データ解析理論
2-2. 数学的概念: **健康状態から疾病状態に分岐する直前の疾病前状態(遷移状態)において生体分子ネットワークの不安定化プロセスを数学的に解析し、病態悪化の引き金を引くサブネットワークを、動的ネットワークバイオマーカー(DNB: Dynamical Network Biomarker)として検出する数理的手法を構築した。**

3. もたらされる効果: 様々な疾病において**病態悪化の予兆を検出し、未病状態での超早期治療が可能に。**
 従来の意味での個々のバイオマーカーとしての性能は全く高くないが、ネットワークとしては極めて高機能で様々な難病において病態悪化の予兆検出が可能で、全く新しいネットワークバイオマーカーの概念(動的ネットワークバイオマーカー: DNB)を提案。
病態悪化前の対応が可能となり、超早期診断および未病状態での超早期治療による治療効果の大幅な向上、医療費削減等の効果が見込める。



水平展開: 種々の疾病治療のみならず、**様々な複雑ネットワーク不安定化**(例: 大量の再生可能エネルギー導入時の電力システム、経済データの不安定化)や細胞分化などの予兆検出への応用が可能。

タンパク質の物性の推定、構造・機能解析

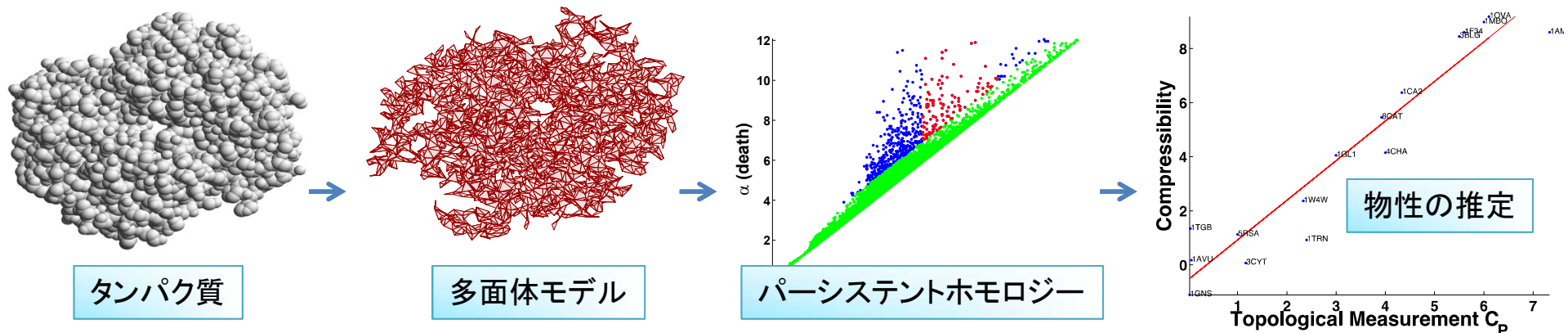
平岡裕章(九州大学マスフォアインダストリ研究所)

1. 課題: タンパク質の物性には実験では分かりにくいものもあり、例えば**柔らかい部位(反応度の高い部位)**を、**タンパク質の立体構造データから推定することも困難**。この推定のための低計算量かつ高精度な手法の開発が望まれている。

2-1. 数学的手法・理論: トポロジー、パーシステントホモロジー、表現論、モース理論

2-2. 数学的概念: タンパク質の立体構造データの**粗視化**により**幾何構造の本質的部分(どの部分に穴が多いか等)**を抽出し**定量化**することで、その物性(柔らかさ等)を推定。また、これにより科学技術分野への応用上重要となる高速数値計算が可能になる。

3. もたらされる効果: タンパク質の種々の**物性値の推定、実験前の初期予測**、実験の合理化などが可能になる。また逆問題を考えることで、物性値に強い影響を与えるタンパク質内の特定の幾何構造を検出し、**求められる物性のタンパク質の設計、創薬の合理化**などにつながる事が期待できる。



水平展開: 材料の種類によらず、**ガラス、金属材料などへも同様に適用可能**。パーシステンスデータベース構築によるマテリアルインフォマティクスへの展開。またビッグデータの大域的解析手法としても応用。

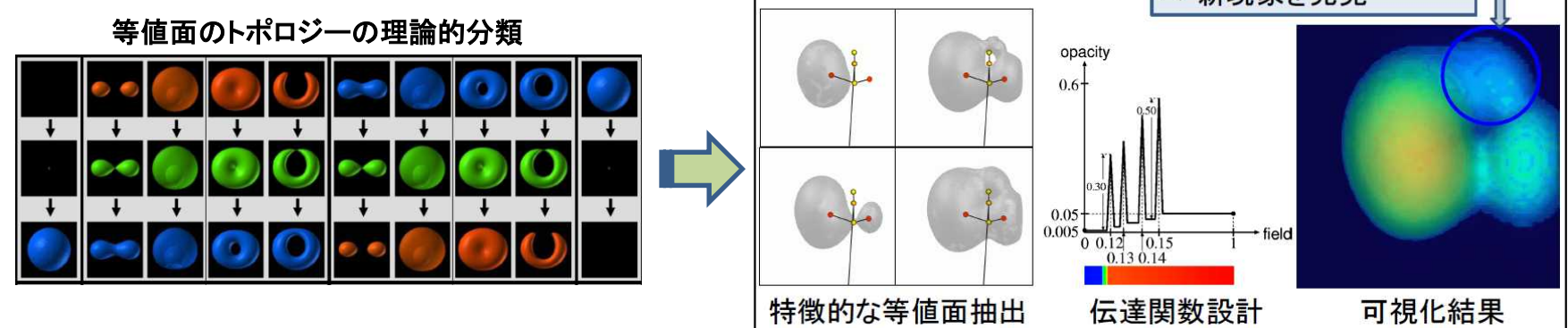
関数データの可視化

1. 課題:ビッグデータ解析において、データからはすぐには見えてこなかったものを抽出する

2-1. 数学的手法・理論
微分位相幾何、特に特異点論
2-2. 数学コンセプト
例えば、陽子と水素原子の衝突の際のエネルギー分布関数の数値シミュレーション結果について、トポロジーが変化する等値面を強調するように伝達関数を設計することで、その部分が強調されて可視化される。

3. もたらされる効果
シミュレーションだけではすぐには見えて来なかった現象(この場合だと、陽子と水素原子の衝突後にエネルギーが戻ってくるような現象)の可視化が可能となる。

例:陽子と水素原子の衝突解析



水平展開:地形形状の位相解析、核融合等の科学シミュレーション結果の解析
数学へのフィードバック:離散写像の特異点論、具体例・新現象の発見ツール