

研究テーマ：高速通信を利用した受容体 - 薬物結合シミュレーションとゲノム教育に関する研究（1/2） （プロジェクト番号JGN-P 1 2 5 1 7）

研究機関： 東京農工大学工学部

研究の概要：

ゲノム情報の応用分野として、創薬のためのコンピュータシミュレーションにギガビットネットワークを利用することを一つの目的とし、ゲノム情報分野を志す若い研究者や一般の人たちへのゲノム教育にギガビットネットワークを利用することをもう一つの目的として本研究課題を計画した。これまで、まず研究用のネットワークを構築し、シミュレーションの実験を行った。ネットワーク経由のコンピュータシミュレーションを意識して、計算そのものの負荷は比較的小さいC30というタンパク質断片のエネルギー計算を行った。タンパク質の立体構造の温度変化とアミノ酸配列の変異による変化をシミュレーションし、温度を上げると構造がほどける方向の妥当な結果を得ることができた。それと同時に、高速ネットワークによる計算機実験の可能性を確認することができた。また、ゲノム教育のためのネットワークを構築することと、講義のためのストリーミングをいくつか製作した。

研究の目的：

ゲノム研究は非常に広い分野に関係しているので、高速ネットワークの利用も多岐にわたって可能である。様々な問題の中で、本研究では、ゲノム情報からのタンパク質の立体構造ダイナミクスを計算することと、ゲノム研究の成果を社会により深く理解してもらうための会議・講義を行うことを目的とした。

具体的には、図1の通り、ゲノム情報を使った

研究として東京大学医科学研究所との間をJGNでつなぎ、医科学研究所にあるコンピュータを用いたタンパク質の構造ダイナミクスの計算を行う。また、ゲノム研究に関する社会との接点形成としては、奈良先端科学技術大学院大学とつなぎ、啓蒙のためのビデオ企画編集の会議と試験講義を行う。

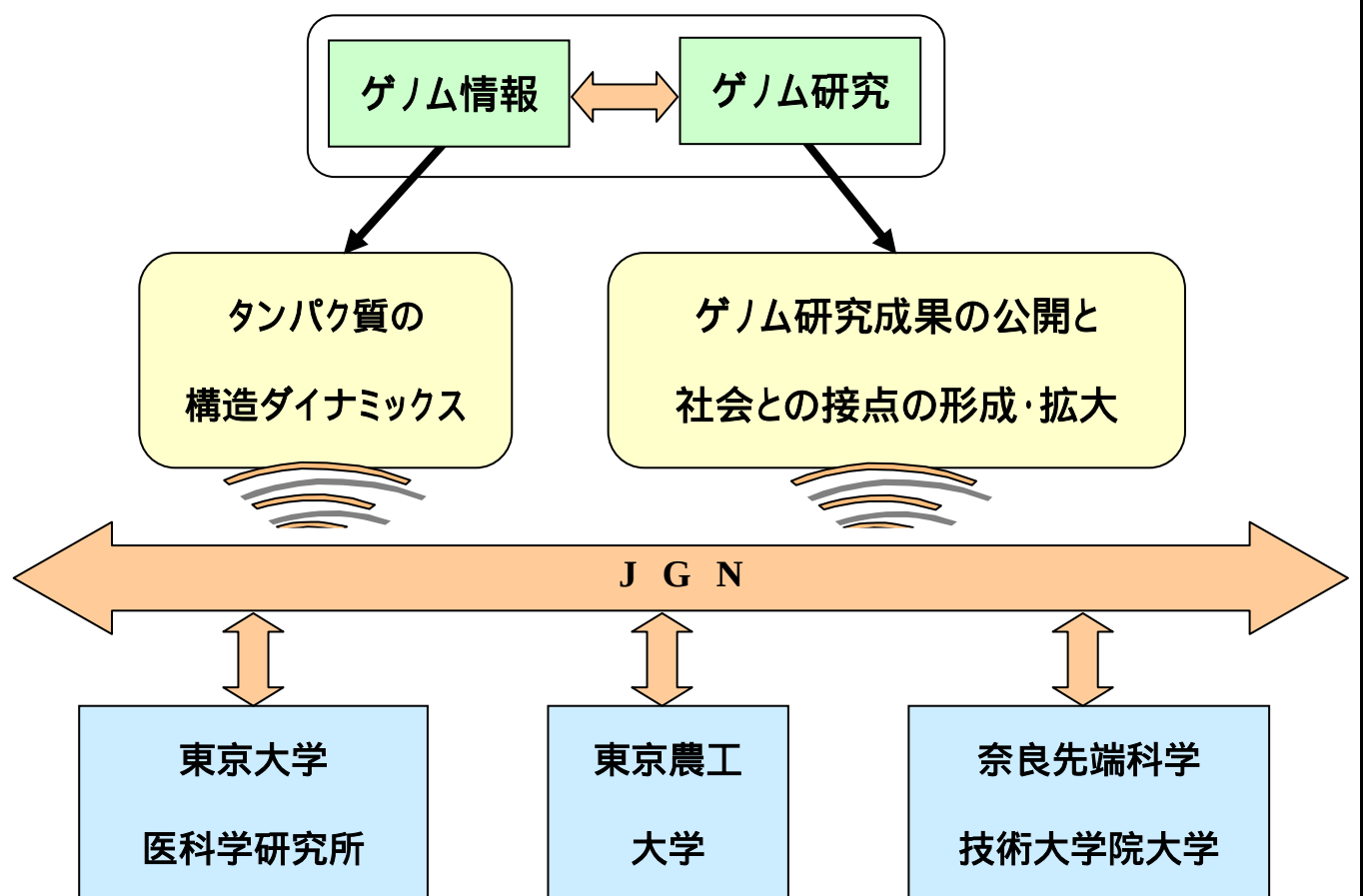


図1. ゲノム研究と社会との接点

研究テーマ：高速通信を利用した受容体 - 薬物結合シミュレーションとゲノム教育に関する研究（2/2） （プロジェクト番号JGN-P 1 2 5 1 7）

研究機関： 東京農工大学工学部

研究開発状況：

膜タンパク質の分子シミュレーションでは、格子モデルを用いて、候補構造を計算することを計画した。その方法自体は東京農工大学で開発されているので、医科学研究所にあるエネルギー計算ソフトウェアAMBERによって実際に立体構造を推定する。しかし、計算時間が非常にかかるので、通信の実験には適切なサンプルとはならないことが分かった。そこで、計算自体は α -ラクトアルブミンという水溶性タンパク質の一部であるC30というアミノ酸30残基からなる断片の計算を行った。

一方、奈良先端大学院大学との間で計画している社会との接点を形成するための会議・試験講義に関しては、詰めの段階となっていて、機材のセッティングを行っている。また、ゲノムひろばという企画に関しても、議論を進める予定である。

研究開発成果：

図2に示すように、水中のC30について計算を行った。もともとC30はかなり大きな水溶性タンパク質の断片なので、他の部分がない状況では、立体構造がほどけることが予測される。実際、シミュレーションを行った結果、水の中では次第に分子がほどけていく様子が分かった。ただ、計算を行った時間がまだ短いので、どのくらいほどけるかなど、詳細は次年度に残された課題である。

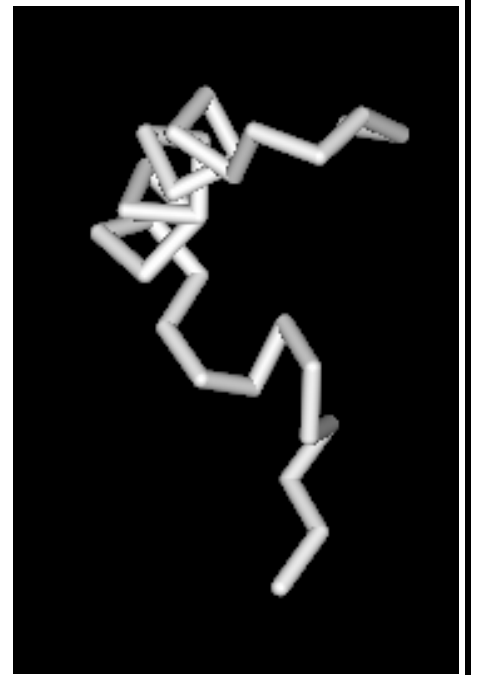
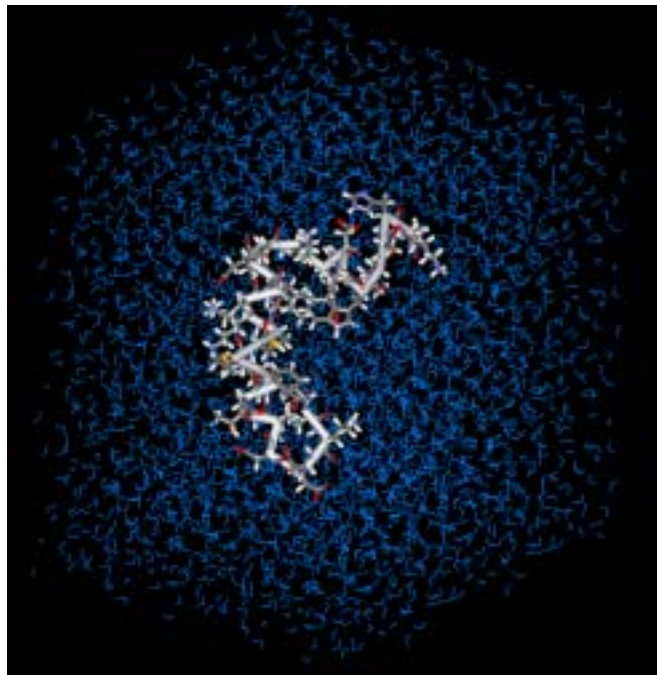


図2 . C30のシミュレーション結果

温度、pH、膜との相互作用なども今後計算を行う必要がある。

今後の予定と将来の展望：

社会との接点を形成するための試験研究は、計画が遅れていて、今後早急にこれを進め、次回の発表の機会にはそれを中心に発表したいと考えている。将来的にも、社会に向けてのゲノム研究の発信は非常に重要な課題で、残りの時間ではそれについての検討を急ぎたい。11月の9, 10日（東京お台場）16, 17日（福岡エルガーラ）23, 24日（京都ぱるるプラザ）には、「ゲノムひろば」という企画を計画しており、これをビデオ撮影することになっている。こうしたコンテンツをどう利用していくことができるかということの実験も考えたいと思っている。