

異分野から生命科学へ： 計算化学と実験の融合に向けて

—仕事の現状と今後の展望—

福井一彦
産業技術総合研究所
生命情報科学研究センター(CBRC)
大規模計算チーム

Overview

- I. バックグラウンド
アメリカでの研究
- II. CBRCでの現在の研究
MASS & SIMULATION
- III. CBRC人材養成・育成について

Nanotechnology: Polymer Nano-particle

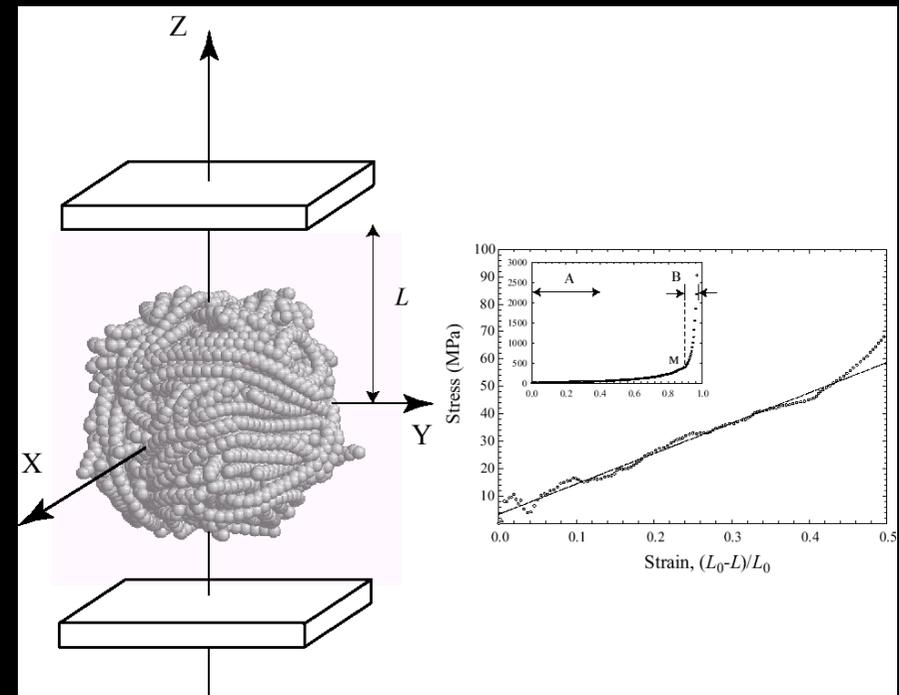
Stress-Strain

Nano-particle Property

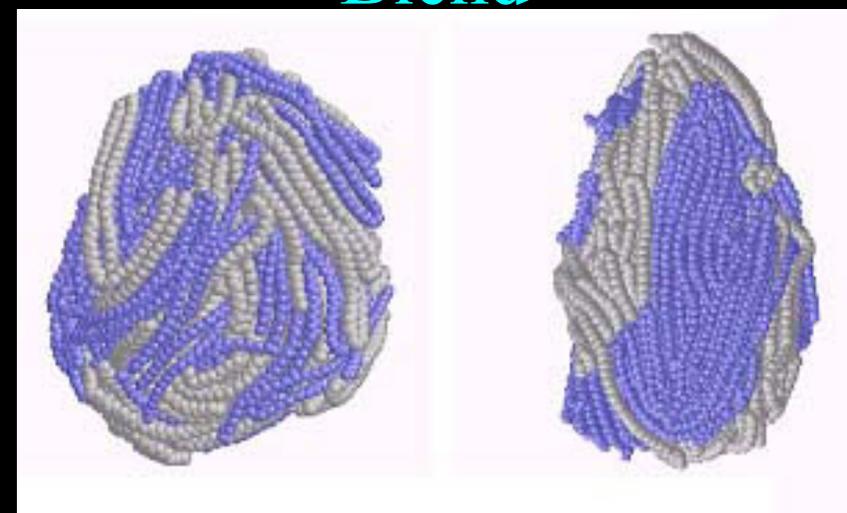
- Thermal
T_m, T_g, C_p
- Mechanical
Stress
- Physical
Size, Blend, Chain-length
- Electrical

Molecular Dynamics

Targets: PE, PEP, aPP, PIB



Blend



Bulk or Particle ?

独立行政法人 産業技術総合研究所 生命情報科学研究センター

<http://www.cbrc.jp>

生命情報科学研究センター(CBRC)は、バイオインフォマティクス技術の研究開発を目的として、平成13年4月に独立行政法人 産業技術総合研究所内に設立されました。

バイオインフォマティクスとは

21世紀のバイオテクノロジー産業の基盤を支える技術でもある生命情報科学(バイオインフォマティクス)は、ゲノム配列からタンパク質分子の立体構造・機能、それらの細胞・組織・個体内での相互関係に至るまでの幅広い生命現象を、情報論的な立場から取り扱う総合的な科学です。

将来、バイオインフォマティクスの発展とともに、必要となる実験の量の軽減、コストの軽減、開発時間の短縮、倫理・安全問題の解消などの貢献が期待できます。



青海フロンティアビル

東京都江東区青海2-43

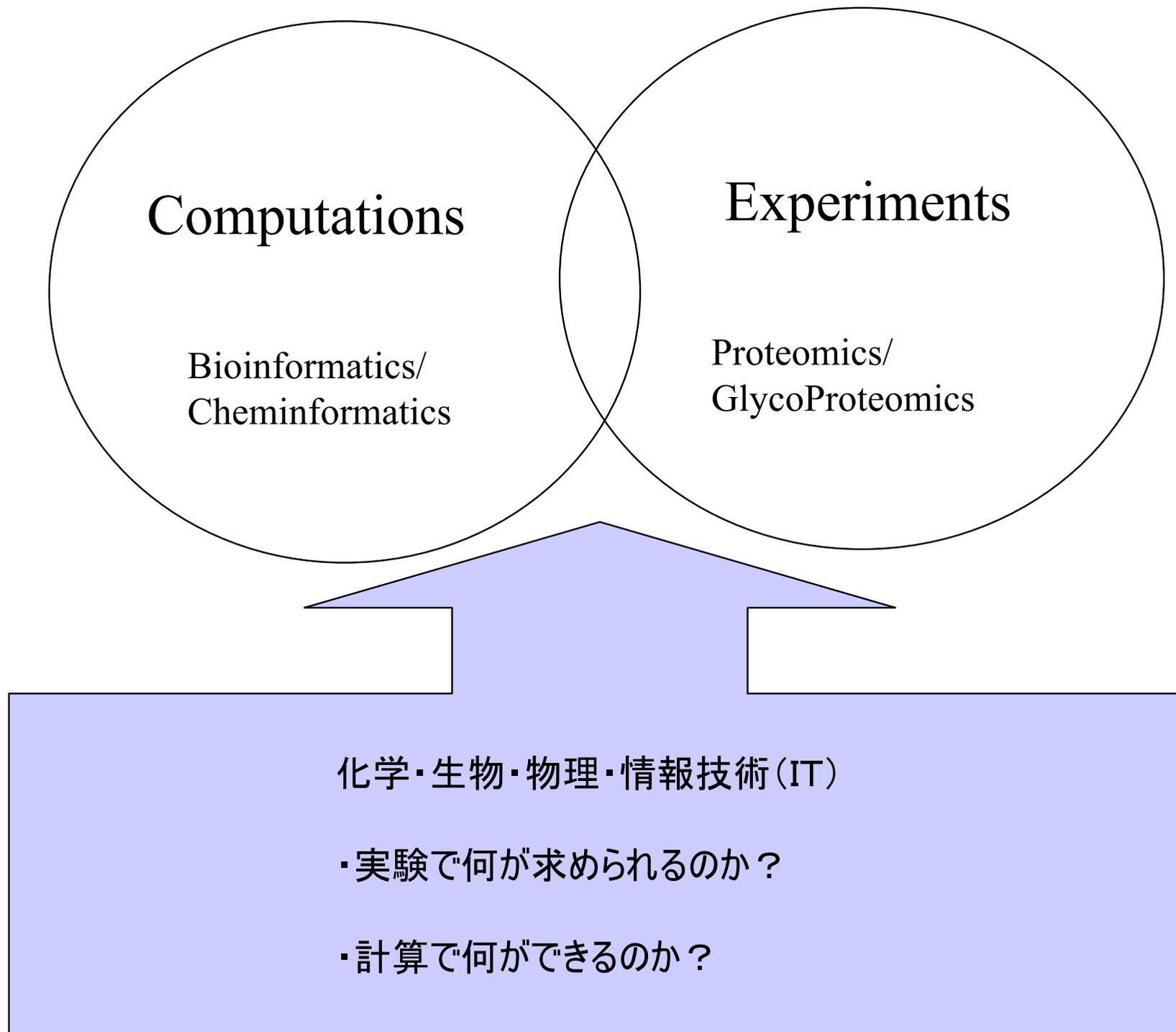
青海フロンティアビル17階



臨海副都心センター

東京都江東区青海2-41-6

両輪としての計算と実験



産総研生命情報科学研究センターでの研究

分子情報科学チーム(04/2001~04/2003)

- 質量分析計によるペプチドフラグメント解析
(CBRC 高橋TL)
 - レーザー励起反応 (IRMPD)
 - 衝突誘起解離(CID)
- 分子シミュレーション
(CBRC 秋山TL)
 - 大規模分子軌道計算
 - 分子動力学計算

大規模計算チーム(04/2003~)

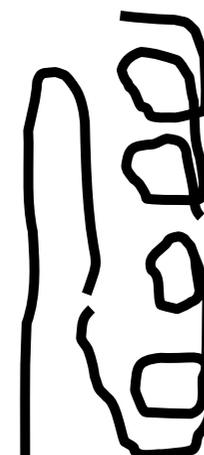
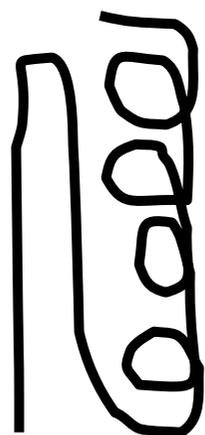
質量分析による糖鎖・糖ペプチド構造解析



レーザー誘起反応によるポリペプチド切断

ポリペプチド

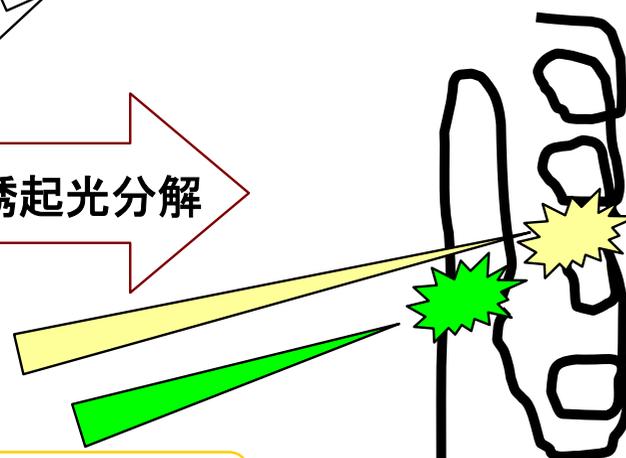
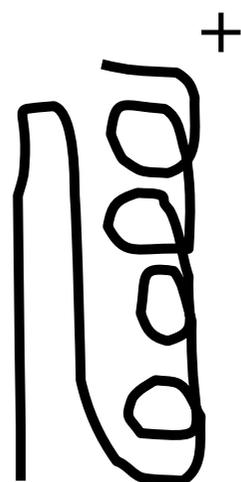
消化ペプチド断片



例:トリプシン

Arg, Lys 残基のC端側を加水分解

至適pHは7.5-8.5



レーザー光

糖鎖構造解析 SGCALシステム

Structural Glycomics Calculation System (SGCAL)

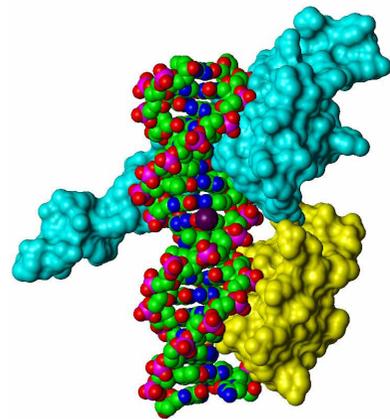
The screenshot displays the SGCAL web interface within a Microsoft Internet Explorer browser. The main content area shows a 3D ball-and-stick model of a branched glycan structure. To the left of the model is a list of glycan symbols: B1a/Y2a, C1a/Z2a, B2a/Y1a, C2a/Z1a, r1, r2, r3, r4, Mana1---0---6Mana1-----0---6Man, Mana1---0---3+, r11, r12, r21, r22, B1b/Y1b, C1b/Z1b, B1c/Y1c, C1c/Z1c. Below the model is a table of interaction data.

結合距離	共鳴項	結合次数	スコア検定 (1:1:1)	測定値 P: 851	測定値 D: 599	測定値 D: 688	
1	C1b/Z1b 1.410663	C1c/Z1c -14.0104	B1b/Y1b 0.902322	B1b/Y1b 95	599.252 (100.00)	436.993 (100.00)	436.998 (100.00)
2	C1c/Z1c 1.410197	B1b/Y1b -14.0549	B2a/Y1a 0.912343	C1c/Z1c 95	689.294 (18.92)	599.291 (19.37)	599.328 (31.62)
3	B1b/Y1b 1.410186	C1a/Z2a -14.0903	C1c/Z1c 0.914585	C1b/Z1b 88	600.263 (12.80)	438.026 (6.70)	629.324 (33.76)
4	B2a/Y1a 1.409786	C1b/Z1b -14.1303	C1a/Z2a 0.929372	B2a/Y1a 87			
5	C1a/Z2a 1.409374	B2a/Y1a -14.1473	C1b/Z1b 0.931491	C1a/Z2a 85			
6	B1a/Y2a 1.402111	B1a/Y2a -14.5076	B1c/Y1c 0.939159	B1a/Y2a 73			
7	C2a/Z1a 1.399469	C2a/Z1a -14.5198	B1a/Y2a 0.943831	B1c/Y1c 68			
8	B1c/Y1c 1.390133	B1c/Y1c -14.8500	C2a/Z1a 0.957294	C2a/Z1a 68			
生成熱				-1109.236 kcal/mol			

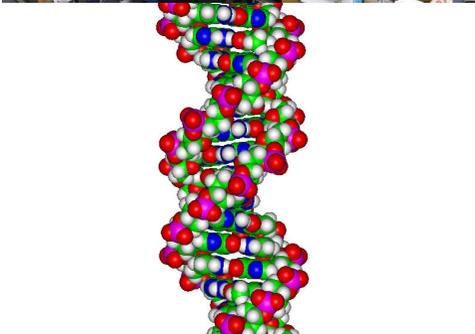
Distance (Å) plot for A-039-c6 showing the distance between oxygen atoms (Oxgen) in the glycan structure. The plot shows a peak at approximately 14 Å. Below the plot is a table of glycan interactions and their distances to Na+ ions.

グリコシド結合	Naとの距離
1 6Man3-Mana1	3.592984
2 Mana1-6,3Manb1	5.281258
3 6,3Manb1-6Man3	6.028618
4 Mana1-3,6Manb1	9.635868

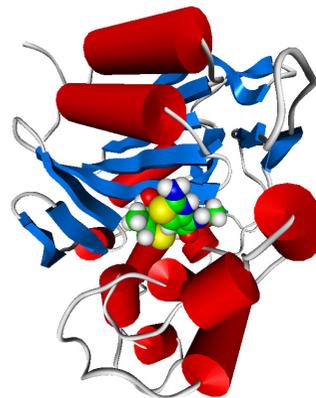
生命情報科学研究センターでは、バイオインフォマティクスの基盤となるアルゴリズムや情報表現手法の研究から、多くの実験データを総合して生物学的な事実を推論・予測するための情報処理システムの構築、およびこれらを駆使した様々な生物ゲノム情報の網羅的解析まで、幅広い研究を行っております。



計算機科学、数学・物理・システム工学などの出身者と、生物・医学系出身者の学際的な協力を促進するような組織づくり



世界最大級の1040プロセッサのPCクラスタを活用した大規模で網羅的な研究



産学官との連携を重視し、民間企業や大学との共同研究、研究員の受入、21世紀の生命情報科学を支える人材の養成への積極的な取り組み

独立行政法人 産業技術総合研究所・生命情報科学研究センターでの 人材養成、人材育成について

生命情報科学研究センターでは、平成13年(2001年)度より文部科学省科学技術振興調整費・新興分野人材養成コース(バイオインフォマティクス)をスタートし、平成15年(2003年)度ではバイオ人材育成事業を行いました。バイオインフォマティクスの研究を進めると同時に、バイオインフォマティクス分野での人材を補うために実践の中で育成しております。



研究チーム

生命情報科学研究センター

遺伝子情報系

アルゴリズムチーム

数理モデルチーム

配列解析チーム

分子機能系

生体膜情報チーム

タンパク質機能チーム

分子設計チーム

生命システム系

細胞情報チーム

大規模計算チーム

8チームの研究チームで組織されています。

CBRCセンター長

秋山 泰

CBRC副センター長

諏訪 牧子

総括研究員

浅井 潔

CBRC職員数(2004. 8月現在)

研究員	16名
併人・招聘	3名
ポスドク	17名
テクニカルスタッフ	7名
客員研究員	8名
共同研究員	3名
技術研修員	33名
研究系合計	87名
事務系職員	27名
総合計	114名

アルゴリズムチーム長

後藤 修

数理モデルチーム長

浅井 潔

配列解析チーム長

ポール・ホートン

生体膜情報チーム長

諏訪 牧子

タンパク質機能チーム長

野口 保

分子設計チーム長

広川 貴次

細胞情報チーム長

高橋 勝利

大規模計算チーム長

秋山 泰

実施内容

◆養成者数

	平成13年度	平成14年度	平成15年度
リーダー養成	4	4	5
学際研究者養成	8	15	13
アノテーター養成	2	4	2
企業研究者養成	8	10	13
受託学生指導	6	9	16
合 計	28	42	49

◆セミナー開講数

	平成13年度	平成14年度	平成15年度
生命情報科学特別講義	29	40	30
専門セミナー	64	87	83
合 計	93	127	113

◆シンポジウムの開催

2002年から人材養成コース シンポジウムを開催。2004年で3回目を迎えます。招待講演を中心に人材養成の被養成者の研究発表、ポスター発表などを行っております。

- ・第1回 開催日:2002年10月4日 会場:日本科学未来館 みらいCANホール
- ・第2回 開催日:2003年10月3日 会場:日本科学未来館 みらいCANホール
- ・第3回 開催日:2004年10月1日 会場:日本科学未来館 みらいCANホール

(現在、10月4日に開催する第3回目のシンポジウムの参加をWEBにて受付中)

URL <http://www.cbrc.jp/training/index.html>

就職ほか

◆主な就職先

(独)産業技術総合研究所、(独)理化学研究所、慶應義塾大学、金沢工業大学、
(独)放射線医学総合研究所、(株)情報数理研究所、立命館大学、など

◆主な受入れ企業(企業研究者)、大学(受託学生)

(株)情報数理研究所、富士通エフ・アイ・ピー(株)、東京大学大学院、
奈良先端科学技術大学院大学、早稲田大学大学院、東京工業大学大学院など

(順不同)

「人材育成事業」とは

独立行政法人 産業技術総合研究所は、発展途上でもある先端研究において研究開発現場において求められる人材を育成するため、研究開発に直接携わりながらスキルアップを目的とした人材育成の事業です。

◆活動内容

バイオインフォマティクスの全般にわたる基礎的知識と、OJT訓練において選択した研究チーム別テーマに関する比較的専門性のある知識を得られ、またその転向のための教育方法のノウハウを得ることができます。また育成の後に、バイオインフォマティクス関係のベンチャー企業、ソフトハウスなどへ就職できる程度の若手人材を輩出しております。

- ・特別講義、専門セミナーへの参加
- ・実際の研究現場でOJT的に研究開発能力を得るために研究チームへの配属
- ・関連企業への見学訪問、あるいは担当者との交流会

◆育成者数

平成15年度 3名

産学官連携

CBRCの研究成果や活動が社会に還元されるよう、大学、民間企業、公立研究所等の外部機関との産学官の連携。

◆主な事業

- ・受託研究、共同研究、委託研究など
- ・特許実地許諾、権利譲渡、技術研修、見学対応
- ・客員研究員・ポスドクの受入、大学院との連携

生命情報科学人材のインキュベーションセンター

◆産総研 生命情報科学人材養成コース(文部科学省事業)

平成13年度 文部科学省科学技術振興調整費・新興分野人材養成(バイオインフォマティクス)に提案し、採択された事業。(5ヵ年計画)

◆バイオ人材育成プログラム(経済産業省事業)

バイオテクノロジー産業の現場が必要とするスキルを備えた人材を効率的に育成し、即戦力として輩出することを目的にしたプログラム。