

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発

研究代表者名：秋山泰

所属機関：国立大学法人 東京工業大学

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

近年、DNA シーケンシング技術の開発により、短時間で大量の DNA 情報が得られるようになった。我々は、この大量データを処理するため、大規模並列計算環境を利用した次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発を行っている。平成 26 年度に引き続き、大規模並列計算環境として「京」を利用し、メタゲノム解析（環境中における微生物集団のゲノム解析）パイプラインとがんゲノム解析パイプラインの開発を円滑に進めるため、「京」と互換性の高い SCLS 計算機システムを利用した。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：大規模モンテカルロ・シミュレーションによる核医学イメージングの研究

研究代表者名： 福地 知則

所属機関： 国立研究開発法人理化学研究所

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 3 月 31 日

2. 研究概要：

現在、我々のグループでは、理化学研究所・情報基盤センターの RIKEN Integrated Cluster of Clusters (RICC) および HOKUSAI を用い、新規装置の開発を目的として、核医学イメージング装置の一つである陽電子断層撮影法のシミュレーションを進めている。将来的に、さらに大型で複雑な核医学イメージング装置のシミュレーションを計画しており、「京」を用いた大規模計算を実行するためのシミュレーション・プログラムの並列化、およびチューニング、またそれらの動作検証を SCLS 計算機上で行った。シミュレーションを用いて新規の用核医学イメージング装置の設計を検証することにより、実際の装置を製作する時間とコストを大幅に削減できる。また、大規模なモンテカルロ・シミュレーションを用いることにより既存の装置の最適な使用法を検討することも可能であり、近年核医学イメージング装置の普及とともに問題となって来ている被験者および医療従事者の被曝量について算定するとともに、有効な防護方法を検討し、基礎研究から臨床現場にまで、広く有益な情報を提供できると考えている。これにより、核医学イメージングを現在よりさらに有用なものとし、特に高精度の画像を得ることによる創薬研究等の加速により、近年増加の一途をたどる国民医療費に歯止めをかけ、老若男女を問わず全国民が健康であり、個々人が充実した人生を送ることができる社会をつくための技術基盤となると考えている。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：細胞環境中の分子シミュレーションとその為の新規手法開発

研究代表者名：松永 康佑

所属機関：理化学研究所 計算科学研究機構

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

我々のチームでは細胞環境シミュレーションや超巨大分子のシミュレーションを高速に行なう為に、京コンピュータなどで従来のプログラムより高速なシミュレーションが実現できる分子動力学プログラム GENESIS を開発している。細胞環境シミュレーションや超巨大分子のシミュレーションを実施するには、京コンピュータの様な大規模な計算機資源が必要とされる。しかし、その様な大きなシステムのシミュレーションを一度失敗すると、短時間の計算であっても多大な CPU 時間を消費する事になる。従って計算をなるべく失敗させない必要があるが、その為には念入りの準備が必要となる。事前準備には 2 つあり、一つはシステムのテスト計算、もう一つはプログラムの準備である。本年度は、昨年に引き続き、プログラムの準備・テスト計算の為に SCLS 計算機システムを利用した。更に、京コンピュータ用に開発したソフトウェア (GENESIS, REIN など) のメンテナンスおよび、テスト利用として使用した。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：細胞シミュレーション統合プラットフォームの開発

研究代表者名：須永 泰弘

所属機関：理化学研究所 情報基盤センター

利用期間：平成27年 4月 1日～平成28年 1月31日

2. 研究概要：

次世代計算科学研究開発プログラムでは「京」コンピュータで動作する細胞シミュレーション統合プラットフォーム(RICS)を開発した。RICSは細胞内の空間構造を考慮し、場によって異なる生化学反応、物質拡散、膜機能を連成した計算が可能である。

平成27年度は水チャネルであるアクアポリンの機能を検討するために、CARS(coherent anti-Stokes Raman Scattering)顕微鏡とRICSを用いて経上皮水透過性の検討を行った。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：大規模生命データ解析

研究代表者名：宮野 悟

所属機関：東京大学医科学研究所

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

ゲノム由来の生命データを大規模・網羅的に解析し、生命プログラム・パーソナルゲノムの理解を深化させ、細胞・疾患の本態をシステムとして暴き出し、個別化医療介入予測を行うことを目的に、「京」に実装すべきプログラムの開発とテストを行う。

平成 28 年 2 月 18 日

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：テーラーメイド型人工赤血球の酸素運搬効果の予測評価に関する解析技術の確立

研究代表者名：百武 徹

所属機関：横浜国立大学

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

現在開発中のナノカプセル型人工赤血球は単一の性能であるが、将来的には個々の循環器疾患に対応したテーラーメイド型へと発展することが予想される。そういった状況を見据えて、申請者は、微小血管網での赤血球および人工赤血球の組織への酸素供給過程に関して、血管内だけではなく血管外の組織までも含めた各成分の対流，拡散，反応の解析を行い，人工赤血球の性能を的確に予測評価できる解析技術の開発を目指す。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：蛋白質複合体の相互作用予測に基づく薬剤候補分子のスクリーニング手法の構築

研究代表者名：水口 賢司

所属機関：国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

STING (stimulator of interferon gene) は、細胞が病原体に感染した際などに生成される低分子との結合により、STING 下流の蛋白質を刺激しインターフェロン産生を誘導する。よって、低分子リガンド結合による STING のシグナル伝達機構の解明、および、活性化リガンドの同定は、抗がん剤や免疫賦活化剤の開発などの創薬に有用な情報を与える。本研究ではリガンド結合型および非結合型ヒト STING の MD シミュレーションを実行し、シグナル伝達機構の解明を行う。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：並列計算機を用いた創薬関連ソフトウェアの利用と創薬現場での利用可能性の検討

研究代表者名：志水 隆一

所属機関：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 3 月 31 日

2. 研究概要：

グランドチャレンジなど国のプロジェクトで開発したアプリケーションで、ある程度ワークフローやマニュアルが整備されているものについて実習形式中心の講習会を製薬企業を主な対象に開催した。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：一本鎖核酸の塩基スタッキングの安定性

研究代表者名：陶山 明

所属機関：東京大学

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

近年、基礎科学のみならず、創薬・診断やバイオ・ナノテクノロジーの分野においても、一本鎖オリゴ核酸の利用が拡大している。それに伴い、一本鎖核酸の塩基スタッキング (Single-Strand Base-Stacking: SSBS) の安定性の配列依存性に関する定量的な知見が強く求められるようになってきた。SSBS は一本鎖オリゴ核酸の構造や相互作用に大きな影響を与えるからである。しかし、SSBS の安定性と核酸配列との定量的関係は、核酸二重鎖を安定化する塩基対スタッキングの場合と比べて、ほとんど明らかになっていない。これは、様々な配列をもつ一本鎖オリゴ核酸に対して、実験により SSBS の形成・崩壊を調べるのが難しいからである。

一方、近年の力場パラメータの改良や計算機性能の向上に伴い、分子動力学シミュレーションにより、一本鎖オリゴ核酸の SSBS の形成・崩壊を調べるのが可能になってきた。ジヌクレオチドの SSBS が網羅的に調べられ、プリン塩基同士のスタッキングがより安定であることなど、SSBS の安定性の配列依存性が定量的に明らかにされている。しかし、より長い配列については網羅的な研究がほとんどなく、長い配列の SSBS の安定性がジヌクレオチドの SSBS の安定性の配列依存性で説明できるかどうかは明らかになっていない。

本研究では、全原子の分子動力学シミュレーションを用いて、ジヌクレオチド、トリヌクレオチド、テトラヌクレオチドの一本鎖 DNA のすべての配列に対して SSBS の形成・崩壊を調べ、一本鎖オリゴ核酸における SSBS 安定性の核酸配列依存性を定量的に明らかにする。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：血栓症バイオメカニクスの大規模計算機シミュレーション

研究代表者名：坪田健一

所属機関：千葉大学

利用期間：平成27年 4月1日～平成28年 1月31日

2. 研究概要：

血栓症は、血流のうっ滞が原因の1つであるが、その詳しい仕組みは十分理解されていない。本研究では、血栓の形成／成長現象と投薬による抗血栓現象のバイオメカニクスモデリングおよびその大規模シミュレーション法を開発し、血流挙動と血栓症との関係の定量的な理解を目指す。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：数値解析と実験的解析を融合させた細胞内タンパク質輸送メカニズムの検討

研究代表者名：世良俊博

所属機関：九州大学大学院工学研究院機械工学部門

利用期間：平成27年 4月 1日～平成28年 1月31日

2. 研究概要：

タンパク質キナーゼの一種である PKC α (Protein kinase C α)は, Ca²⁺とジアシルグリセロール (DAG) によって活性化することで, 細胞移動や血管新生など細胞内の様々な生体機能において重要な役割を果たす. 過去のシミュレーション研究により細胞外薬剤刺激による PKC α の化学的な活性化機序は既に明らかとなっているが, これらは反応速度式で構成された無次元のシミュレーションであり, 時空間的な物質移動については考慮していない. そこで, 細胞モデル内の拡散による物質移動と代謝の両方を考慮した3次元シミュレーションを行い, シミュレーション結果と実験結果で比較検討した. 本研究では、特に Ca²⁺の細胞内拡散について検討した。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：多様な遺伝子セットによる遺伝子ネットワーク推定

研究代表者名：土井 淳

所属機関：株式会社セルイノベーター

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

公開されている大量のマイクロアレイデータを用いて、遺伝子ネットワークを推定し、データベース化を行う。そのデータベースは、これまでにデータベース化されている、タンパクタンパク間相互作用や、文献情報を元にした遺伝子間相互作用のネットワーク（パスウェイ）とは異なる、新たなタイプの相互作用のデータベースとして利用できるものである。主な対象となるデータは、近年蓄積の多い、がん細胞や、iPS などの幹細胞系のデータを用いることを計画している。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：緑色蛍光蛋白質の蛍光機構等の解明および機能改変を目指した大規模並列マルチレベル分子動力学シミュレーションプログラムの開発整備

研究代表者名：米澤康滋

所属機関：近畿大学 先端技術総合研究所

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

バイオイメージングのレポーター遺伝子として緑色蛍光蛋白質 (Green Fluorescent Protein: GFP) は世界中の様々な研究室で活用されている。2008 年には下村等に対して GFP の発見と生命科学への顕著な貢献に対してノーベル化学賞が与えられた。GFP は蛋白質内部の自己脱水結合によって分子内に形成される発光団が蛍光を発するが、最も肝心な GFP の電子励起状態に関わる蛍光メカニズムは殆ど解明されていない。バイオイメージングに貢献し得る光スイッチング蛍光蛋白質の開発に貢献する為に GFP の蛍光メカニズムを解明する事は重要であり、これに加えて一般的な蛋白質機能構造への応用研究を目指して、我々は並列古典/量子力学連成分子動力学シミュレーションプログラム (platypus-QM、QM/MM) の開発を京のグランドチャレンジ以来続けてきた。本研究申請では、この platypus-QM 及び QM/MM プログラムの開発整備・改良とその応用を推進することを目的としている。

本 27 年度は、SCLS を利用して申請者らが開発した高並列マルチレベル分子動力学シミュレーションプログラム platypus に様々な開発・改良を実施してさらに高速かつ精密な計算シミュレーション計算実施を目指す事を研究目的とし、さらに platypus に関する研究開発に関する論文を完成させてその性能を国内外に広報する事を目指した。具体的な研究ターゲットとしては、(1)大阪大学松田らが作成した様々な蛍光特性を示す GFP の変異体 Sirius を、電子励起状態を含む QM/MM 分子動力学シミュレーションで研究しその蛍光発生メカニズムを解明して、その知見を基に新たなバイオイメージングの扉を開く機能性蛍光ツールを開発する基本的な情報を提供する事と、(2)他の重要な蛋白質系への応用を可能にするため platypus プログラムをさらに高並列かつ高速な汎用分子シミュレーションプログラムとして開発整備する事、(3) 応用事例による platypus の詳細な性能評価、を目指した。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名： 分子動力学計算を用いたアロステリック部位の探索

研究代表者名： 鷹羽 健一郎

所属機関： 旭化成ファーマ株式会社

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

アロステリック薬は副作用を回避したより安全な治療薬としてその開発が期待され、弊社においてもアロステリック薬の研究開発は重要な課題の一つである。分子動力学（MD）計算はアロステリック部位を探索する上でとても有用な手段になり得ると考えている。本研究ではアロステリック部位の探索における MD 計算の有用性を検証し、さらにアロステリック部位を高速かつ精度高く探索できる手法の確立を目指す。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：エピゲノミクスとトランスクリプトミクスを統合した精神神経系疾患診断系の開発

研究代表者名：石井一夫

所属機関：東京農工大学

利用期間：平成27年4月1日～平成28年1月31日

2. 研究概要：

徳島大学精神医学講座との共同研究により取得した精神神経系疾患患者（うつ病、総合失調症など）由来の血液検体のマイクロアレイ、次世代シーケンサーによるエピゲノミクスおよびトランスクリプトミクスデータを使用して統合し、モンテカルロ法などの大規模計算によるデータ解析（多変量解析、機械学習（サポートベクトルマシン））を行い多次元データによる精神神経系疾患の診断系を確立する。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：アンチセンス核酸配列設計を指向した mRNA 三次元構造予測

研究代表者名：高木 達也

所属機関：大阪大学

利用期間：平成27年4月1日～平成28年1月31日

2. 研究概要：

mRNA は蛋白質への翻訳などをつかさどる生命活動に必須の分子である。したがって、これに相補的な配列を用いたアンチセンス核酸を用いることで、RNaseH による分解などをはじめとした蛋白質への翻訳を抑制することができる。よって、アンチセンス核酸は医薬品の候補化合物の一つとして期待されている。しかしながら、DNA とは異なり RNA は一本鎖で存在するため、ワトソン-クリック塩基対以外にもフーグスティン塩基対をはじめとした多様な塩基対を形成し、その三次構造は非常に複雑なものとなっている。それゆえ、RNA の構造予測については二次構造が中心となっているものの、シュードノットの存在などの理由により、完全な二次構造予測は困難となっている。それゆえ、アンチセンス核酸の配列探索に関しては、現在のところ相同性配列を用いた網羅的な探索研究が中心となっている。それゆえ、実験的な検討回数および費用の削減という観点から、*in silico* 手法を利用した標的配列の予測は非常に重要である。

アンチセンス核酸の配列設計については、標的となる mRNA の三次構造（特にアンチセンス核酸との相互作用の起点となりうるループ構造）が重要となるため、三次構造をある程度予測できればアンチセンス蛋白質の配列設計が容易になると考えられる。そこで、三次構造予測を行う必要があるものの、現在公開されている予測法の大半は二次構造予測の結果を用いて行うものが主であり、その二次構造はシュードノットを予測できない（できるものでも実験などによる既知情報の入力が必要である）ものが多いため、より正しい構造予測には程遠いものがある。一方、二次構造予測を利用しない三次構造予測として、分子動力学法などを用いた *ab initio* 構造予測に関しても検討例があるものの、こちらはサンプリング時間が短いことなどの理由から、十分な構造予測に至っていないのが現状である。

そのような背景下、本研究ではレプリカ交換法をはじめとした拡張サンプリング法および粗視化モデルによる RNA の三次構造予測を行う。RNA のフォールディングには蛋白質同様長大な時間を要するものの、継時的な構造変化の追跡は不要であるため、これらの拡張サンプリングが有用である。また粗視化モデルを用いると、より長時間の継時的な構造変化を追跡することが可能であるため、こちらも強力な手段となりうる。そこで、今年度は本システムを利用して、粗視化モデルを中心としに三次元構造予測に関する検討を行った。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：変性状態における蛋白質構造の MD シミュレーション

研究代表者名：油谷 克英

所属機関：理化学研究所 放射光科学総合研究センター

利用期間：平成 26 年 8 月 28 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

蛋白質の天然構造の研究は精力的に行われているが、生理的条件下で天然状態と平衡にある変性状態の構造研究は、大変に遅れている。そこで、本研究では、私たちが開発した本研究に有利な超好熱菌由来の Pyrrolidone Carboxyl Peptidase (PCP)の構造モデルを用いて、Molecular Dynamics(MD)シミュレーションで天然状態と平衡にある変性状態の構造を理解することを目指している。「生理的条件下で天然状態と平衡にある」PCP の変性状態を D1 状態と呼んでいる。具体的には、汎用 MD ソフトウェア GROMACS を用いて AMBER99sb 力場による MD を行なった。PCP モノマーは 208 残基である。PCP の D1 状態を作成するために、700-1000K で変性させたのち、simulated annealing によって、温度を下げ、常温より高い、450K と 400K で、数種の 1-2 μ s の MD シミュレーションを行った。450K で既に、 α ヘリックス及び β シートの形成と崩壊の推移が見られ、推移の揺らぎは当然のことながら温度を下げることで緩やかになっていった。400K でのシミュレーションの中には、天然状態での二次構造に対応する部位に集中して二次構造の形成が見られたものがあつた。NMR 実験で見られた D1 状態での α -4、 α -6 ヘリックスの安定性は MD シミュレーションにおいても確認された。これらの結果は、今後、「京」スパコンの援助を得るなどして、更なる長い時間の PCP の MD シミュレーションによって D1 状態の構造を実現させることが可能であることを示している。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：SiGN-BN を用いた膵ランゲルハンス島の遺伝子ネットワーク推定

研究代表者名：南茂 隆生

所属機関：国立研究開発法人 国立国際医療研究センター研究所

利用期間：平成 27 年 1 月 7 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

膵ランゲルハンス島（以下、ラ氏島）はインスリンなど血糖値の制御に重要となるホルモンを分泌する微小内分泌臓器であり、その機能不全は糖尿病の発症と関連する。ラ氏島の網羅的転写産物解析から、遺伝子の発現変化を知ることができるが、それらの因果関係について直接の情報を得ることはできない。この点を明らかにすべく遺伝子ネットワーク推定を SiGN-BN を用いて行い、ラ氏島生理機能の考察・糖尿病成因解明に役立てる。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：ドッキングと分子動力学シミュレーションを組み合わせた効率的バーチャルスクリーニング法の開発

研究代表者名：妹尾昌治

所属機関：岡山大学

利用期間：平成 26年 8月 28日～平成 28年 1月 31日

2. 研究概要：

タキソールは標的タンパクである β -チューブリンに結合して、微小管を安定化し、その脱重合を阻害する。これにより細胞分裂を阻害するため、強力な抗がん剤として臨床使用されている。しかしながら、水溶性が低く、薬剤として使用するためには、特殊な溶剤を必要とする。これによる副作用も報告されており、水溶性を高めた、より扱いやすい誘導体の開発が求められている。我々の研究グループでは、新規な水溶性タキソール誘導体の開発に取り組んでいる。今回、水溶性を大幅に向上させた3種類の新規タキソール誘導体を合成し、チューブリン重合活性を評価した結果、わずかな構造の違いにより、チューブリン重合活性に顕著な差が生じることを見出した。この実験事実を合理的に説明する知見と今後の分子設計指針を得るため、ドッキングによる評価と分子動力学シミュレーションを行うこととした。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：分散並列計算機における第三世代密度汎関数計算プログラムの開発と評価

研究代表者名：佐藤 文俊

所属機関：東京大学

利用期間：平成27年4月1日～平成28年1月31日

2. 研究概要：

カノニカル分子軌道計算から得られる波動関数は、化学物質の物性の解析に有用な多大な情報を与える。スペクトル解析の難しい大規模分子であれば、ますます分子軌道計算の重要性が高まる。大規模分子のカノニカル分子軌道計算には、大量の計算機資源(メモリと CPU)が必要である。分散メモリ型並列計算機上での演算には、高いロードバランスが求められる。並列計算機で効率的にカノニカル分子軌道計算を行う方法の一つとして、申請者らは第三世代密度汎関数法を提案した。第三世代密度汎関数法は SCF サイクルにおいて計算律速となる分子積分・数値積分を行わず、行列演算のみで波動関数が得られる計算方法である。

第三世代密度汎関数計算法では、クーロン項・Fock 交換項の計算にコレスキー分解法を、そして密度汎関数法の交換相関項計算にはグリッドフリー法を用いている。本研究ではコレスキー分解を用いたクーロン項・Fock 交換項計算ならびに交換相関項計算をさらに効率化し、分散メモリ型並列計算機において効果的に基底状態計算が行えるプログラムの開発を行った。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：拡張アンサンブルインターフェースプログラムの開発と生体分子シミュレーションへの応用

研究代表者名：宮下尚之

所属機関：近畿大学生物理工学部

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

拡張アンサンブルの一つである多次元レプリカ交換インターフェースを京コンピュータなどで実現する REIN(Replica Exchange Interface Program)というプログラムのアップデートと REIN 講習会の実習、及びアルツハイマー病の初期過程の研究における生体分子シミュレーションの為に SCLS 計算機システムを利用する。REIN は京コンピュータに関わるグランドチャレンジプロジェクト(ISLiM)で作成したプログラムであり、これまで HPCI 戦略プログラム 分野 1 による REIN 講習会を毎年 1 回開催していた。これまでその講習会の実習で SCLS 計算機システムを利用した経験があった。今年度は 9 月 1 日に開催したが、実習を行なう事ができなかった為、講習会では SCLS 計算機システムの利用をしなかった。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：プリンヌクレオチド生合成系における酵素反応機構の理論的解析

研究代表者名：山本典史

所属機関：千葉工業大学

利用期間：平成27年4月1日～平成28年1月31日

2. 研究概要：

プリンヌクレオチド生合成系で炭素付加が起こるステップは、構造的に類似する酵素 (PurD/PurK/PurT/PurP, PurN/PurU, PurH) で触媒される。PurD/PurK/PurT/PurP および PurN/PurU は、共通する祖先タンパク質から派生したひとつのファミリーに属する酵素である。本研究では、電子状態計算および分子動力学計算を用いた理論的解析に基づき、PurD, PurN, PurU 酵素が関与する反応機構を明らかにし、これらの酵素群が形成されるに至った進化的な過程の解明に取り組んだ。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：複数ペプチド系の全原子分子動力学シミュレーションを用いたアミロイド形成機構の解析

研究代表者名：黒田裕

所属機関：東京農工大学

利用期間：平成 27 年 4 月 1 日～平成 28 年 1 月 31 日

2. 研究概要：

アミロイドは様々な神経変性疾病の原因とされる β シートから成る線維状構造を形成する蛋白質凝集体である。 β シート線維構造の詳細な形成機構は明らかになっていないが、「コア配列」と呼ばれる数残基の配列が、蛋白質のアミロイド形成を決定すると考えられている。本研究では、コア配列を有するペプチドの分子動力学シミュレーションを用いて、アミロイド形成における各残基の役割について解析を試みた。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：遺伝子ネットワーク解析を用いたカンキツのカロテノイド代謝酵素遺伝子群を制御するキー遺伝子の推定

研究代表者名：藤井浩

所属機関：国立研究開発法人 農研機構果樹研究所

利用期間：平成27年 4月 1日～平成28年 2月22日

2. 研究概要：

カンキツ類は生活習慣病等の予防に寄与する機能性成分としてカロテノイド類の一種 β -クリプトキサンチン(β -Cry)を多く含む。 β -Cry 高含有化のための分子育種をめざして、カロテノイド代謝酵素遺伝子の制御機構に関して、マイクロアレイや expression QTL 解析を行い、転写因子制御遺伝子の絞り込みを進めてきた。本研究では独自に開発したオリゴDNA マイクロアレイを交配集団の果実に適用した結果を入力データとし、SCLS に導入されている SiGN により有向のネットワーク解析を行い、カロテノイド代謝酵素遺伝子と e-QTL により絞り込んだ転写制御遺伝子群におけるネットワーク解析を行い、キー遺伝子候補を得た。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：生命の起源に関する第一原理的ボトムアップシミュレーション

研究代表者名：田中成典

所属機関：神戸大学

利用期間：平成27年 4月 1日～平成28年 1月31日

2. 研究概要：

「約 43-35 億年前の地球において、隕石の衝突がもたらす高圧・高温環境下で、当時地球上に存在していた酸化的な物質組成から生命の起源分子が生成された」とする説を提唱している実験グループと共同して、(I) 彼らの衝撃波模擬実験を計算機シミュレーションによって再現し、次いで、(II) 実験室での模擬実験が困難である実際の隕石衝突条件下での超高圧・高温シミュレーションを実行することで、実際に原始地球で起きたであろう有機分子生成過程を模擬する。今年度は特に、生体有機分子の重要な窒素源となるアンモニア生成過程について量子力学的な計算機シミュレーションを用いて検証を行った。

SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：鼻腔内遷移流れの直接数値シミュレーション

研究代表者名：田中 学

所属機関：千葉大学

利用期間：平成27年 4月 1日～平成28年 1月31日

2. 研究概要：

鼻腔は極めて複雑な三次元形状を有する器官であり、生命活動の維持に不可欠な嗅覚機能、吸入空気の加温・加湿機能、ウィルスや花粉等の異物除去機能を果たしている。これらの機能は内部の気流に応じて発現するが、微細・複雑形状下の気流の in-vivo 計測は困難である。本研究では、鼻腔機能を正確に予測・診断するため、医療画像から3次元鼻腔モデルを構築し、鼻腔内遷移流れの直接数値シミュレーションを実施した。