

# 生体分子情報学研究室 (国立研究開発法人産業技術総合研究所)



客員教授：上野 豊 uenoyt@ni.aist.go.jp  
客員教授：福井 一彦 k-fukui@aist.go.jp

## バイオインフォマティクスで生命科学の謎を解き明かす

### 研究を始めるのに必要な知識・能力

生物学か計算機かどちらかが好きであることが必要です。いくら取り組んでも苦にならないと思えることです。研究を始めるには大学教養程度の生物学の知識は必要ですが、新しい学術知識・計算機技術を研究と並行して常に勉強していきます。そのため、大学院という場で研究に挑戦しようとする強い決意によって、自分の能力を引き出していただきます。研究室内外の仲間や先輩、先生方と議論しながら自分の研究スタイルを確立してゆきます。

### 研究室の指導方針

1つのテーマを持って研究に取り組む事を通じて、様々な問題解決を体験しながら配属した研究所での研究活動に参加します。技術職として将来発生する新しい問題を解決できる力をつけていただきます。与えられた状況下で、専門知識を元に物事の本質をつかみ、様々な問題解決に取り組む人材育成を目指します。

### この研究で身につく能力

ゲムデータベース、タンパク質の分子メカニズム、分子動力学による分子機能の解析、プログラミング技術、システムエンジニアリングの方法論等の技術的な知識の習得が可能です。

研究開発やプレゼンテーションだけでなく、新しい科学技術に携わる企画や営業における様々な問題解決に立ち向かうことのできる技術職としての総合的な力をつけていきます。

### 修了生の活躍の場

各種製造業の研究開発、システムズエンジニア、ソフトウェア開発、営業職、大学および研究所職員、など様々です。

### 研究内容

タンパク質など生体分子の機能とそのメカニズムを探るための、バイオインフォマティクスの手法開発を進めています。大規模計算機を活用した網羅的な探索、さらに実験のデータにある情報の欠損を補う解析法の開発など、情報工学的な手法で生命科学における知識発見を目指します。

実験的に機能が解析された分子の立体構造から仕組みを理解するために、分子力場によるシミュレーションが必要です。標的分子の機能を探るため、各種分子生物学的データベースにある関連情報を活用します。情報科学によって実験データにある情報をより深く捕らえる手法を研究します。

#### システム数理情報統合基盤の開発

大規模計測データからオミックス関連データを抽出し、分子プロファイリング技術により標的薬剤候補の探索やドラッグリポジショニングに繋がる研究を試みます。またデータをより効率的に利用するため、データと解析要素技術を柔軟に組み合わせ可能とするワークフロー解析基盤の構築に取り組み、セマンティック技術を用いた知識発見を進めています。

#### タンパク質複合体の相互作用シミュレーション

タンパク質同士または核酸や低分子との複合体における分子認識メカニズムを探るため、複合体の分子動力学および量子化学計算から相互作用を解析します。PDB立体構造データベースに見られる相互作用を網羅的に探索した相互作用の統計をもとに、標的分子とのドッキング予測を試みます。

#### 電子顕微鏡単粒子画像からの構造解析

タンパク質複合体の電子顕微鏡画像を解析するため、加算平均でノイズ除去する粒子像をクラスタリングするアルゴリズムを改良して解析の信頼性を上げ、不完全な実験データからの解析を試みます。

#### 分子構造モデリングスクリプトの開発

動作しているタンパク質の構造情報を捉えた各種実験データに合う立体構造のモデルを構築し、動作メカニズムを検証します。捉えた構造変化は、タンパク質分子アニメーションで可視化します。これらを効率的に表現できるスクリプト言語の開発と実用化を進めます。

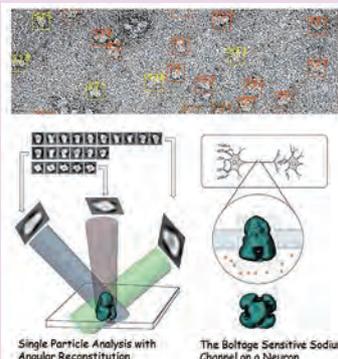


図3：タンパク質の電子顕微鏡による単粒子解析の概要

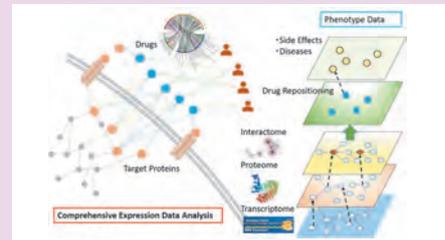


図1：オミックス解析によるドラッグリポジショニングの例

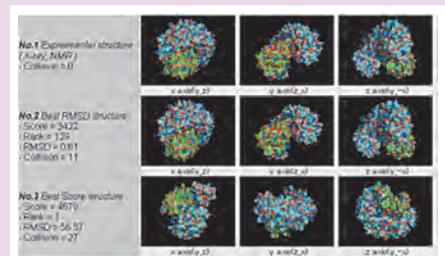


図2：タンパク質-タンパク質のドッキング予測計算の例

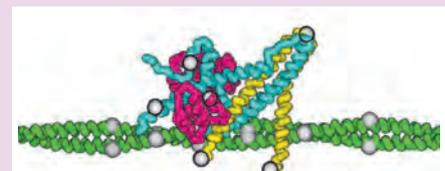


図4：筋収縮を制御するトロポニン・トロポミオシンの相互作用

### 研究環境

本研究室は、平成12年より継続する国立研究開発法人産業技術総合研究所・生命情報科学センターとの連携活動を中心に展開してきました。東京大学や早稲田大学の連携研究室も併設され、国内外のバイオインフォマティクス、AI、計測実験などの幅広い分野をカバーした研究者によるセミナーなど、センター内外の研究者との交流の場があります。

### 研究設備

産業技術総合研究所内の大規模計算機  
力覚フィードバック6自由度入力装置 (Geomagic社製)