

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年4月20日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[代表者所属機関・部局]
名古屋大学・大学院情報学研究科
[職・氏名]
教授・長岡正隆
[課題番号]
JPJSBP1 120199935

1. 事業名 相手国: 米国 (振興会対応機関: OP)との共同研究

2. 研究課題名

(和文) データ科学で強化された計算分子技術の日米共同研究:複合生体分子系の機能の解明

(英文) Japan-USA Joint Research Project of Molecular Technology Reinforced with Data Scientific Approaches: Clarifying Functions of Complex Biomolecular Systems

3. 共同研究全実施期間 令和元年 4月 1日 ~ 令和4年 3月 31日 (3年 0ヶ月)

4. 相手国代表者(所属機関・職・氏名【全て英文】)

Boston University, Professor, John. E. Straub

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		1,937,119 円
内訳	1年度目執行経費	1,667,013 円
	2年度目執行経費	270,106 円
	3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究全実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	10名
相手国側参加者等	3名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	5		2(-)
2年度目	-		-(-)
3年度目	-		-(-)
4年度目			()

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:本委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は本委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流実績の概要・成果等

(1)研究交流実績概要(全期間を通じた研究交流の目的・研究交流計画の実施状況等)

本共同研究の目的は、「計算分子技術」の適用範囲を拡大させるために日米2つの世界トップレベルの研究グループの専門知識を集約することにあった。実際(1)分子夾雑状態における複合生体分子系に関して卓越した業績を上げてきた理論化学・生物学者である J.E. Straub 教授(ボストン大学)を代表者とする米国側チーム(T)と(2)名古屋大学大学院情報学研究科 複雑系科学専攻を中心とする日本側 T との国際共同研究 T が、データ科学(DS)で強化された計算分子技術(先端計算分子技術)を開発・展開して複合生体分子系の機能解明を目指して相互訪問などを重ね、学術論文を発表したり国際会議を開催したりして、研究交流実績を上げた。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

日本側 T は、アンサンブル MD 法を用いて、タンパク質フォールディングなどの非平衡非定常過程に対する時間空間情報を収集し、アロステリー制御における非部位特異的相互作用の役割を理解するために時系列クラスタリング(TSC)法(DS 手法)を初めて適用した。実際、ヘモグロビンの機能発現の理解に向けて、酸素濃度や塩化物イオン濃度の異なる条件でアトミスティックシミュレーションを実行し、その時系列データに TSC 法を適用した。従来、化学・生物系の MD シミュレーションデータには、TSC 技術はあまり使われてこなかった。しかし、生物系の MD トラジェクトリの時系列データにも DS 解析が適用し得るといふ本研究の知見は学術的成果と言える。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

米国側 T は、それまでに展開してきた脂質二重層の粗視化シミュレーションから得られる凝集構造データに対して、生体分子の機能発現や凝集過程に対する環境変数依存性を調査した。得られた一連の研究成果に関して、2019年9月1日~2日に開かれた研究交流会「StudyCamp2019」において学術交流し、米国側 T 代表者 Straub 教授の解説を交えた講演後、若手研究者や院生との意見交換を通して、粗視化モデルと全原子モデルとの相違等の理解を深めた。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

米国側 T は、これまで展開してきた脂質二重層の粗視化シミュレーションを、現代的諸問題のひとつである現代病アルツハイマー型認知症の一因と考えられている β アミロイドに対して適用した。さらにその粗視化データに対して、Motion Tree (MT) 法を適用してその凝集変遷についての解析を行い、その克服と解決に資する可能性を見出した。その点は社会的貢献に繋がると言えるかもしれない。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取り組み、成果)

日本側 T から若手研究者小池・栗崎と大学院生高橋・鈴木が、2019年10月27日~11月4日の日程で、相手国米国ボストンに渡航滞在して研究交流し、それまでの共同研究で得られた成果の共有および打合せを進めて、名大・ボストン大の双方における「複合生体分子系の先端計算分子技術」の知識・技術を相互提供して補完した。こうした研究交流実績は、栗崎らの学術論文(J. Phys. Chem, B, **125**, 12670 (2021))として実を結んだ。この論文のグラフィカルアートは、その号の表紙を飾るなど、若手研究者にとっての大きな励みとなった。

(6)将来発展可能性(本研究交流事業を実施したことにより、今後どの様な発展の可能性が認められるか)

研究計画の立案時点では、予想できなかった、新型コロナウイルス感染症の蔓延のため、計画の後半では渡航して行う、対面でのシンポジウムや集中講義の開催を中止せざるを得なかった。一方、オンラインミーティングの利点も明白になった。ただ、オンラインミーティングでは、日米間の時差の問題や、ネット経由では共有できない秘密情報や大規模データ、現地施設の利用など、デメリットがあることも事実である。将来的には、オンラインミーティングの利点と、現地で実施する対面活動との併用が、一層の共同研究の発展に繋がるものと期待される。

(7)その他(上記(2)~(6)以外に得られた成果があれば記述してください)

例: 大学間協定の締結、他事業への展開、受賞、産業財産権の出願・取得など

本共同研究への参加者であった大学院生高見と田中が、日本コンピュータ化学会 2020 年秋季年会と 2021 年春季年会で、それぞれ SCCJ 奨学賞を受賞した。