

事後評価報告書

1. 研究課題名：

「ハイパフォーマンス計算環境における単粒子画像 3次元解析ソフトウェアの開発」

2. 研究代表者名：

2-1. 日本側研究代表者：産業技術総合研究所 上野 豊

2-2. フランス側研究代表者：遺伝・分子・細胞生物学研究所 Patrick Schultz

総合評価： 良

3. 研究交流実施内容及び成果：

ナノスケールの分子構造を決定する単粒子解析のための高速なソフトウェアを開発することが目的であり、日本のグループの提案する新しいアルゴリズムを適用して計算の並列化を進め、フランス側グループの豊富な実験データと経験を活用して構造が既知な標準分子を用いて実際に極低温電子顕微鏡で画像を収集し、新規解析手法の有効性を実証している。

日本側は、単粒子解析プログラム BESPA の実用化とプログラムの並列化、フランス側グループの収集した単粒子画像を用いた標準データの確立、構造変化のある粒子画像の分類などの研究を実施し、それぞれの項目で成果を得ている。

フランス側は、実験データを従来法による画像分類と日本側で作成したプログラム BESPA による比較、極低温電子顕微鏡を用いた単粒子画像の収集、構造変化のある粒子画像の分類について投影角の違いを検出する日本側と共同で考案するなどの成果を得ている。

4. 事後評価結果：

4-1. 総合評価

日本側とフランス側の役割分担が相補的であり、当初計画したプログラム開発の目的は概ね達成されたと認められる。

単分子レベルの立体構造の決定は、特にたんぱく質などの機能と構造の関係を解明するために重要であり、この研究はそれを複数の透過電子顕微鏡像から再構成するアルゴリズムを並列計算環境で実現する試みである。このような重要かつ特徴ある研究を日仏の研究者が協力して一定の成果を上げている点が評価できる。

しかし、本事業の趣旨である研究交流による新たな知の創造、今後の交流発展の可能性を広げる成果の達成は部分的である。また、今後の研究交流の活発化あるいは持続的発展の可能性に関しては、その素地が十分に形成されたとは言えない。

4-2. 研究交流の有効性

研究交流により単粒子解析のための高速なソフトウェアを開発するという目標に対して、プログラム開発の基本的な部分は達成されたことは評価できる。しかし、本研究交流によって新たな知の創造や新分野の開拓には至っていない。

また、日本側からの交流積算日数が 83 日であるのに対して、フランス側からは 0 日であり、対等性のある十分な交流ができたかどうか疑問が残る。

4-3. 当初目標の達成度

日本側とフランス側の役割分担が相補的であり、当初計画したプログラム開発の目的は概ね達成されたと認められる。しかし、共著の論文が一件も発表されていないことなどから、共同研究の達成度が必ずしも高くない。

また、研究交流が日本からフランスへの一方通行であり、今後の研究交流につながる人材育成の点で達成度に疑問が残る。