B353

α -ラクトアルブミン C30 領域の分子動力学

○北井 祐史¹、園山 正史¹、荻原 洋一²、寺田 松昭¹、中井 謙太³、美宅 成樹⁴ (¹東京農工大・工、²東京農工大・総合情報メディアセンター、³東大・医科研、⁴名大・院工)

水溶性タンパク質である α -ラクトアルブミン(α -LA)は酸性条件下で変性過程の中間状態であるモルテングロビュール状態をとり、この状態の時 α -LAは脂質膜と相互作用をすることがわかっている。また α -LAのC30領域(F80-A109)は α -LA自体と同様に酸性条件下で脂質膜と相互作用することがわかっていて、C30領域が α -LAが脂質膜と相互作用する際に重要な役割を果たすことが示唆されている。このC30と脂質膜との相互作用を調べることで脂質膜とタンパク質の相互作用のメカニズムを知ることができると考えた。実験で脂質膜と混合する以前のC30は酸性条件下と中性条件下とで構造に違いがあることが観測されている。そこで本研究ではC30の性質(pHによる構造の変化)を分子動力学(MD)シミュレーションで観測することを試みた。

分子動力学計算を行うソフトとしてAMBER6.0を用いた。計算の初期構造としてPDBにある α -LAの立体構造からC30部分の座標を抜き出したものを用いた。古典力学を用いたMDにおいてpHの操作法はまだ確立されていないが、酸性条件を模すためにH⁺を高濃度にするかわりにNa⁺を高濃度にすることで酸性条件の代わりとした(仮酸性条件)。この仮酸性条件下と中性条件下とでC30に対し500Kのシミュレーションを5ns行い、その後300Kのシミュレーションを5ns行った。

その結果、C30の構造は仮酸性条件下では二次構造がすくなく、中性条件下では α -ヘリックスの含量が高かった。実験の結果よりも α -ヘリックス含量が多いが、中性条件下のほうが α -ヘリックスの含量が高くなるという傾向は再現した。本年度ではこの研究の結果や今後の課題について発表する予定である。

Y.Kitai, M.Sonoyama, Y.Hagiwara, M.Terada, K.Nakai, S.Mitaku : alpha-lactalbumin C30 domain of molecular dynamics

B355

アメーバ様生物による輸送ネットワークの効率的な設計

○中垣 俊之、上田 哲男(北大・電子研・細胞機能)

We report here evidence that the effective network is designed by an amoeba-like organism of true slime mold *Physarum polycephalum*, which has network structure of tubular element to circulate materials throughout the organism. When many food-sources were placed at different locations on the agar plate where the organism crawled, the organism moved to every food-source with changing the network shape to connect all food-sources through only a few tubes. Geometrical shape of the network is drastically variable depending on a set of positions of food-source. Statistical observation shows that the network geometry meets multiple requirements for effective network; short total length of tubes, close connection (small number of transit food-sites between any two food-sites) and fault-tolerance against an accidental disconnection of tubes.

T. Nakagaki and T. Ueda : Effective design of transportation network by an amoeba

B354

クラミドモナス細胞周期ダイナミクスのオンチップ1細胞解析

○松村 和典¹、八木 俊樹²、安田 賢二¹ (¹東大院・総合文化、²東大院・理)

[目的] 細胞は環境との相互作用により後天的情報を変化させると考えられている。単細胞緑藻類クラミドモナスでは、光の照射条件(環境)を調節することで、細胞周期(後天的情報)を制御できることが報告されているが、後天的情報の変化の過程や世代間伝承の有無について明らかになっていない。そこで、クラミドモナスの2つの細胞周期制御機構、タイマー(一定時間後に分裂)とサイザー(一定の大きさになると分裂)の役割の理解と、細胞周期の世代間伝承の有無について調べることを目的とした。[実験方法] 集団培養では個々の細胞の情報を得るのは困難であるため、当研究室で開発したオンチップ1細胞培養解析系を用いた。培地の選流による均一な栄養状態を保ちながら、顕微鏡下で観察光の強度や照射時間を制御し、孤立した1つの細胞の細胞周期・分裂数・面積を測定した。

[結果と考察] (1) 2つの細胞周期制御機構の役割¹⁾: 連続照射で培養すると、細胞が面積比で元の大きさの2.2倍になった時に、細胞は分裂し4細胞になった。面積比が1.4~1.7になった時に照射を停止すると、細胞は成長を停止したが、遅延時間を経て分裂し2細胞になった。一方、遅延時間中に照射を再開すると、細胞は成長を再開し、面積比が2.2になった時に分裂し4細胞になった。これらの結果は、サイザーがタイマーより優位な機構であることを示唆する。2) 細胞周期における履歴現象²⁾: 細胞周期を数世代連続計測した。5000lxで成長と分裂を繰り返した細胞に対して、照射強度を2500lxに変えると、1世代目は5000lxで見られた速い成長を示し、2世代目は2500lxに見合った遅い成長に変化した。すなわち、世代レベルでの履歴現象が観察された。

1) Matsumura, et al. *Biochem. Biophys. Res. Comm.* (2003) in press.

2) Matsumura, et al. *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.* (2003) in press.

K. Matsumura, T. Yagi and K. Yasuda : On-chip single-cell analysis of *Chlamydomonas* cell cycle dynamics

B356

粘菌計算機による並列非分散型セルオートマトンの予測的計算の展望

○青野 真士¹、郡司 幸夫^{1,2} (¹神戸大院・自然科学研究科・情報メディア科学、²神戸大・理・地球惑星科学)

真性粘菌(*Physarum Polycephalum*)変形体一個体の各局所部位は、近傍と局所的に相互作用(振動伝達)できるだけなのにも関わらず、上位器官から直接司令を受けるのではない形で(中枢神経系は不在)、個体全体の合理的意思決定を参照・反映する形で挙動できるといった、一見矛盾した特質をもつが、その実現機構は未だ解明されていない。昨年度の年会では、粘菌のこうした特質を活用し、粘菌を計算担体とする計算機を構築する展望が発表された。粘菌計算機でシミュレートする計算スキームは、本来は局所的な相互作用領域のみしか与えられない各部分(セル)が、系全体の整合的状态遷移に齟齬をきたさないよう、自らの挙動を系の非局所/全体を参照する事で決定せねばならないといった、特殊な状況設定に基づくセルオートマトンである。本年度は、昨年度発表された粘菌計算機の設計をさらに発展させ、時刻 $t+1$ の状態 X^{t+1} が、過去(X^{t-1})・現在(X^t)のみならず、未来の状態(X^{t+1})をも参照して決定されるといった時間発展形式(F を時間発展規則とすると $X^{t+1} := F(..., X^{t-1}, X^t, X^{t+1}, ...)$)に基づく、予期的計算系(Computing Anticipatory System, D.M.Dubois)の設計・実装を議論する。また、そうした形式の計算機が、ユーザーの与えた命題を自ら変容させた上で正解を出力する可能性を担っている事を紹介する。例えば、「一切道具を使わずに机の上に卵を立てよ」といった一見行き詰まった命題に対し、底部の殻を潰して卵を立てたコロンブスの解答は、命題に含まれる「殻を割ってはいけぬ」という暗黙の規定を逸脱してはいるが、「ただし殻を割っても構わない」との但し書きが添えられる形に命題を変容して導かれた正解である。こうした創造的解答を実現する計算機の構築可能性を議論する。

M. Aono and Y.-P. Gunji : Anticipatory Computation of parallel non-distributed cellular automata in slime mold computer