

まずは中身を見る

2. 【研究計画】 ※適宜概念図を用いるなどして、わかりやすく記入してください。なお、本項目は1頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

(1) 研究の位置づけ

特別研究員として取り組む研究の位置づけについて、当該分野の状況や課題等の背景、並びに本研究計画の着想に至った経緯も含めて記入してください。

DC/PD共通 1ページ分

ポイント

- **項目別**に記載する（分野の状況、課題、着想に至った経緯）
- 必ず**概念図**を入れる
- 審査員はどこを読むのか？
 - 本研究の位置づけが何か = **どんな課題を解決しようとしているか**
 - 関連文献から**課題が妥当かどうか**がわかるか
 - なぜ本研究を思いついたのか
- 課題・問題点は**否定形**で書く
 - ◎ 「構造を取らないタンパク質には**適用できない**。」
 - 「構造を取らないタンパク質に適用できないという**問題がある**。」
 - × 「構造を取るタンパク質にのみ**適用できる**。」

まずは中身を見る

2. 伝わる申請書にする

2. 【研究計画】※適宜概念図を用いるなどして、わかりやすく記入してください。なお、本項目は1頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

(1) 研究の位置づけ

特別研究員として取り組む研究の位置づけについて、当該分野の状況や課題等の背景、並びに本研究計画の着想に至った経緯も含めて記入してください。

タンパク質間相互作用研究の状況

私は、計算機を用いて生命科学の問題を解くバイオインフォマティクスの研究を行っており、特別研究員としてタンパク質間相互作用 (Protein-Protein Interaction, PPI) の大規模計算による予測という問題に取り組む計画を立てた。PPI とは、生体内のタンパク質が互いに結合などの相互作用をすることによって、機能の促進・抑制や新たな機能の獲得が行われる現象である。PPI の変調が原因である疾病も存在し、タンパク質が相互にどのような制御関係にあるかを理解することが、病因の解明や薬剤の設計において注目されている [1]。特に近年では大規模な PPI ネットワークを解明しようとする研究が盛んに行われるようになった [2]。しかし、PPI の検出法は Y2H 法や MS/MS 法をはじめとする生物学的実験手法が主流である。タンパク質は日々新たに発見され続けており、実験コストは増加する一方であるため、計算機による PPI 予測手法、特に多数のタンパク質群に対する網羅的な PPI 予測 (図 1) への期待が高まっている [2]。

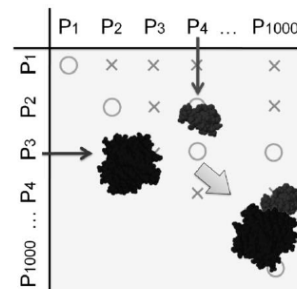


図 1 網羅的 PPI 予測の概略

当該分野の課題

計算機による PPI 予測手法の現状の課題を挙げる。

1. タンパク質配列情報と既知の相互作用情報に基づいた教師あり学習による予測手法が多く提案されている [3]。だが、これらの手法は既知 PPI の類似配列に囚われるため、新奇の PPI の発見が困難である。
2. 構造情報を扱うべく、分子動力学法などの分子シミュレーション手法を利用した PPI 予測手法も提案されている [4]。しかし、分子動力学法では 1 組のタンパク質ペアに対する計算だけで数日から数週間の時間を要するため、多くのタンパク質間での PPI の予測に利用するには全く現実的ではない。
3. タンパク質を剛体と仮定するドッキング計算を用いることで計算時間を削減できる。代表的なソフトウェアにマサチューセッツ大の Weng らが開発した ZDOCK [5] があり、1 組のペアの予測が数時間レベルで行える。しかしこの計算時間では、網羅的な PPI 予測に利用するにはまだ現実的ではない。

本研究計画の着想に至った経緯

私は修士課程の研究で、タンパク質の立体構造を剛体モデルとして計算するドッキング計算を高速化する研究を行ってきた。従来は複素数で表現されていた形状相補性のスコアモデルに対し、実数のみで表現した新たな形状相補性のスコアモデルである real Pairwise Shape Complementarity (rPSC) モデルを考案し、独自のオープンソースソフトウェア MEGADOCK として実装した。これにより、ZDOCK の約 4 倍の計算高速化を達成した (査読付論文誌 投稿中 [6])。しかしながら、創薬のターゲットとなるような PPI には、立体構造が分かっているものや、構造的な揺らぎを持つものも多く存在するため、そのようなタンパク質も扱えるようにする必要があると考えた。また、生体内の PPI ネットワーク解析のためには、さらに数千倍以上の計算高速化が必須であった。スコアモデルの改良に加えて、私が所属する東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME 2.0 に適した並列実装を組合せることで、これを達成できると考えた。

参考文献

- [1] Ideker T & Sharan R. *Genome Res.*, **18**(4):644-652, 2008.
[2] Ravasi T, et al. *Cell*, **140**(5):744-752, 2010.
[3] Shen J, et al. *PNAS*, **104**(11):4337-4341, 2007.
[4] Boehr DD, et al. *Nat Chem Biol*, **5**(11):789-796, 2009.
[5] Mintseris J, et al. *Proteins*, **69**(3):511-520, 2007.
[6] 大上, 他. 情処論:数理モデル化と応用 (投稿中) .

まずは中身を見る

【研究計画】（続き）適宜概念図を用いるなどして、わかりやすく記入してください。なお、各事項の字数制限はありませんが、全体で2頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

(2) 研究目的・内容等

- ① 特別研究員として取り組む研究計画における研究目的、研究方法、研究内容について記入してください。
- ② どのような計画で、何を、どこまで明らかにしようとするのか、特別研究員奨励費の応募区分（下記（※）参照）に応じて、具体的に記入してください。
- ③ 研究の特色・独創的な点（先行研究等との比較、本研究の完成時に予想されるインパクト、将来の見通し等）にも触れて記入してください。
- ④ 研究計画が所属研究室としての研究活動の一部と位置づけられる場合は申請者が担当する部分を明らかにしてください。
- ⑤ 研究計画の期間中に受入研究機関と異なる研究機関（外国の研究機関等を含む。）において研究に従事することも計画している場合は、具体的に記入してください。

（※）特別研究員奨励費の研究期間が3年の場合の応募総額は（A区分）が240万円以下、（B区分）が240万円超450万円以下（DC1のみ）。2年の場合は（A区分）が160万円以下、（B区分）が160万円超300万円以下。1年の場合は（A区分）が80万円以下、（B区分）が80万円超150万円以下。（B区分については研究計画に必要な場合のみ記入）

DC/PD共通 2ページ分

ポイント

- **項目別**に記載する
- **(1)で書いた課題**と対応させる
- 研究内容を3～5個程度のサブ内容に分割して説明すると計画の説明がしやすい（いつ実施するかも書く）
- サブ内容ごとに**マイルストーン達成目標**を示す（何ができればOKなのか）
- **概念図**を入れる

まずは中身を見る

ポイント（①～⑤別） ※①～③で大半は埋まる

①研究計画における研究目的、研究方法、研究内容

- ・ (1)研究の位置づけの分野の課題に対応させると目的がわかりやすい
- ・ 概念図を入れる
- ・ 決まった研究方法があれば書く（具体的な名称も）
- ・ サブ内容ごとに書くと実施時期も説明しやすい

②どのような計画で、何を、どこまで明らかにしようとするのか

- ・ ①で書いたサブ内容も使って、具体的にいつ何をやるか書く
- ・ 「～を示す」「～を達成する」「～を明らかにする」と書く
- ・ 申請から採用までの10ヶ月間でやることも書く

[R5New]・研究費のB区分申請をする場合は、追加的に行うB区分研究の内容も書く

③研究の特色・独創的な点

あまりB区分研究を盛りすぎ無い方がよいと思う。書くとしても3行くらい。
B区分で通らなくても学振DC/PDの研究として成立しているようにすること。
A区分/B区分の選択自体は審査に影響しない。

- ・ 研究計画を客観的に褒める
- ・ 関連研究が全く無いことはあり得ない。文献とともに世界の動向について語り、研究者としての調査能力があることを示す。
- ・ 自身の研究を盛る。関連分野はもちろん、少し離れた分野への波及効果や社会的なインパクト、産業界への影響なども語れると好印象

まずは中身を見る

ポイント（①～⑤別）

④申請者が担当する部分

- ・ ラボのテーマとの関連を書く。関連性が皆無の場合はそう書く。
- ・ 関連性がある場合→**ボスから降ってきただけに見えないように**する
- ・ 自分が主体的に実施すると記載。
- ・ 困難があったときのバックアップ＝相談できる人間がいることは重要

⑤受入研究機関と異なる研究機関での研究従事計画

- ・ 該当しないなら記載なし
- ・ 海外の大学への留学を検討している場合（期間の2/3以内）や、大学と連携する研究所等で研究する計画がある場合などは、ここで具体的に記載

具体的とは？

- ・ 具体的な計画：プランが綿密に立てられている
「**プランAが駄目だったらプランB、プランCを実施する**」
- ・ 具体的な研究：事前実験の結果等に裏付けられた、妄想でない議論
- ・ 具体的な文章：固有名詞や数値情報が散りばめられている

まずは中身を見る

2. 伝わる申請書にする

【研究計画】（続き）※適宜概念図を用いるなどして、**わかりやすく記入**してください。なお、各事項の字数制限はありませんが、全体で2頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

(2) 研究目的・内容等

① 特別研究員として取り組む研究計画における**研究目的、研究方法、研究内容**について記入してください。

② **どのような計画で、何を、どこまで明らかにしようとするのか、具体的に記入**してください。

③ 研究の特色・独創的な点（先行研究等との比較、本研究の完成時に予想されるインパクト、将来の見通し等）にも触れて記入してください。

④ 研究計画が所属研究室としての研究活動の一部と位置づけられる場合は申請者が担当する部分を明らかにしてください。

⑤ 研究計画の期間中に受入研究機関と異なる研究機関（外国の研究機関等を含む。）において研究に従事することも計画している場合は、具体的に記入してください。

① 研究目的、研究方法、研究内容

研究目的 本研究では、MEGADOCK によるタンパク質ドッキング計算の1000倍以上の高速化を達成し、タンパク質の構造情報を利用した大規模PPI予測を行うことを目的とする。さらに、創薬に関わる重要な生物系への応用を目指す。

研究方法・研究内容 以下の4つの項目に従って研究を実施する（図2）。

- 項目(1) 剛体グリッドモデルにおける構造探索の評価関数を簡素化し、精度を維持しつつも高速に計算可能な新しい評価関数を設計する。1つの複素関数に3つの物理化学的効果の項を含む独自の評価関数を提案することで達成する（図3）。
- 項目(2) ネットワークレベルの大規模予測を行うためには大量の計算を迅速に行う必要がある。複数構造の並列計算を行うために、大規模並列計算機で計算を行うための効率的な並列実装を行う。
- 項目(3) 近年ではGPUアクセラレータ搭載型の計算機が主流になりつつある。CUDAによるGPU実装を行い、GPUによる10倍以上の計算の加速を達成する。実装の対象は東工大のスーパーコンピュータTSUBAME 2.0とする。
- 項目(4) タンパク質構造データベースから構造情報を取得し、パスウェイデータベースの情報と組み合わせ、新規PPIの検出を試みる。PPIの関係性がよく知られているバクテリア走化性シグナル伝達ネットワークや、未知のPPIが数多く存在すると考えられるヒトアポトーシスシグナル伝達ネットワークを対象とする。

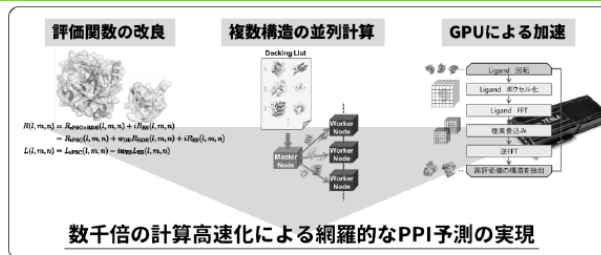


図2 本研究の実施項目(1)~(3)の概要

② どのような計画で、何を、どこまで明らかにしようとするのか

項目(1) 精度を維持したまま計算時間の削減を可能とする新規評価関数の提案（採用前~2年目前半）

修士課程で提案した実数のみで形状相補性を表現する rPSC モデル [6] を活用し、静電相互作用（クーロン力）と脱溶媒和と自由エネルギー項を追加する（図3）。このとき、脱溶媒和を表す接近原子対のエネルギー表をそのまま使うのではなく、相互作用相手となる分子表面に対して平均化した値を用いることで、積和演算を大幅に減らすことができると考えている。従来法 ZDOCK [5] と比較して、同じ計算資源下で最大10倍の計算高速化を図る。平均化した値を用いることによる予測精度の低下の可能性があるが、その場合は50件以上のPPIによるベンチマークデータセットを用い、rPSCも含むパラメータの探索を再実施して最適なパラメータを得ることで、精度低下を極力抑える。

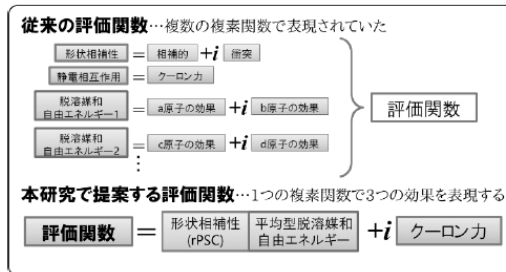


図3 項目(1)の概要

まずは中身を見る

2. 伝わる申請書にする

【研究計画】（続き）※適宜概念図を用いるなどして、わかりやすく記入してください。なお、各事項の字数制限はありませんが、全体で2頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

(2) 研究目的・内容等

① 特別研究員として取り組む研究計画における研究目的、研究方法、研究内容について記入してください。

② どのような計画で、何を、どこまで明らかにしようとするのか、具体的に記入してください。

③ 研究の特色・独創的な点（先行研究等との比較、本研究の完成時に予想されるインパクト、将来の見通し等）にも触れて記入してください。

④ 研究計画が所属研究室としての研究活動の一部と位置づけられる場合は申請者が担当する部分を明らかにしてください。

⑤ 研究計画の期間中に受入研究機関と異なる研究機関（外国の研究機関等を含む。）において研究に従事することも計画している場合は、具体的に記入してください。

（研究目的・内容等の続き）

項目(2) 大規模並列計算機向けの並列実装（1年目～2年目前半）

「京」や TSUBAME はコア数に対するメモリ搭載量が比較的小さいため、単純に複数の MPI プロセスをノード内で同時実行するとメモリが枯渇する恐れがある。そのため、MPI によるノード間プロセス並列と OpenMP によるノード内スレッド並列を組合せたハイブリッド並列化による実装が、並列実装として最適であると考えられ、実際に実装して確認する。強スケーリング（同一問題サイズ下での並列化効率）で約 90% 以上の並列化効率を目標とする。

項目(3) CUDA による GPU 実装（2年目前半～後半）

TSUBAME に搭載されている GPU を活用するため、CUDA による GPU 実装を行う。2つのタンパク質のうち片方の構造の回転に対するループを GPU スレッドに割り当てることで、迅速に計算が可能であると考えられる。MEGADOCK は高速フーリエ変換 (FFT) の汎用ライブラリを必要とするが、CUDA 内の CUFFT ライブラリを使うことで計算が可能である。今後の GPU の性能向上次第であるが、CPU 利用時に比べて Tesla M2050 GPU 利用時に約 20 倍程度的高速化を目指す。

項目(4) パスウェイデータベースの情報から新規 PPI を予測する（3年目前半～後半）

項目(1)～(3)が想定通りに完了した場合、TSUBAME の 100 ノード同時計算により 1800 倍前後の高速化が達成される新たな PPI 予測ソフトウェア MEGADOCK が開発されることになる。これは 1 日で約 4 万ペアの PPI が予測できる速度であり、これによりネットワークレベルの計算が可能となる。この MEGADOCK を用いて、新規 PPI の予測を実際に行う。

タンパク質構造データベースからバクテリア走化性シグナル伝達ネットワークとヒトアポトーシスシグナル伝達ネットワークの構造を収集し、MEGADOCK による全対全計算を実施する。構造が得られていない一部のタンパク質については、Modeller [7] 等のソフトウェアを用いて構造モデリングを行い、複数の構造を準備する。全対全計算の結果、MEGADOCK によって予測された PPI がどの程度既存の PPI をカバーするかを KEGG パスウェイデータベース [8] で確認し、その時点において偽陽性となった予測 PPI が新規の PPI である可能性について BioGrid [9] などの実験 PPI データベースを検索して確認する。

③ 研究の特色・独創的な点

・本研究の特色 本研究の特色は以下の3点である。

1. 立体構造情報を活用し、実際の物理化学的な現象をモデル化した本質的な PPI 予測手法である点。
2. 剛体グリッドモデル計算の高速化を、精度を維持したまま行う新しい評価関数を設計する点。
3. 大規模並列計算機環境上での効率的な実装を行い、PPI の網羅的な予測を実現する点。

・先行研究との比較

多数のタンパク質の立体構造から網羅的に PPI 予測を行う研究は未だかつて存在しない。1つのペアに対する予測手法には精度に特化した別の手法も存在する[10]が、本研究のように大量の PPI を対象とする発想の研究は行われていない。

・予想されるインパクト、将来の見通し

本研究の完成によって、これまで明らかにされていなかった新たな PPI を見出すことが可能となる。構造生物学やシステム生物学などの基礎研究分野の理解が進むだけでなく、新しい創薬ターゲットを発見する研究にも寄与し、作用機序が未解明な薬剤のメカニズム解明、未解明の副作用の原因究明などにも繋がる可能性がある。2010年時点では 80 兆円と推定される低分子医薬品市場のさらなる拡大に貢献するものと考えている。

④ 申請者が担当する部分

項目(1)～(3)については申請者が全て担当する。項目(4)の実施の際には、所属研究室の松崎由理博士研究員にシステム生物学の観点からの助言を頂く。また、松崎研究員が従事するプロジェクトにより「京」のアカウントが取得できた場合には、「京」上の実装を項目(2)に追加する形で松崎研究員と協力して実施する。

参考文献

- [7] Šali A, et al. *Proteins*, 23(3):318-326, 1995. [8] Kanehisa M, et al. *Nucl Acids Res*, 38(S1):D355-360, 2010.
[9] Breitkreutz B-J, et al. *Nucl Acids Res*, 36(S1):D637-640, 2008. [10] Kozakov D, et al. *Proteins*, 65(2):492-506, 2006.

まずは中身を見る

(3) 受入研究室の選定理由 ※各事項の字数制限はありませんが、全体で1頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

採用後の受入研究室を選定した理由について、次の項目を含めて記入してください。

- ① 受入研究室を知ることとなったきっかけ、及び、採用後の研究実施についての打合せ状況
- ② 申請の研究課題を遂行するうえで、当該受入研究室で研究することのメリット、新たな発展・展開

※ 個人的に行う研究で、指導的研究者を中心とするグループが想定されない分野では、「研究室」を「研究者」と読み替えて記入してください。

PDのみ 1ページ分

ポイント

- できるだけ新しい環境に身を置くということを示す
 - ・すでに共著論文が複数あったり、同じ研究室を出た兄弟弟子にあたる研究者のラボを受入研究室とするような場合は要注意
(避けたほうが無難)
- できるだけポジティブに。能動的な理由を記載する。
 - × 「選定した〇〇准教授は当該分野の第一人者である●●教授の弟子」
 - 「選定した〇〇准教授は当該分野で△△という現象を発見し、～～」
- 一応「特例措置希望理由書」も出せるが**ほぼ認められない**
 - ・ 特例措置で採用されたのは H28～R2の5年間で18名

3. 人権の保護及び法令等の遵守への対応 ※本項目は1頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

本欄には、「2. 研究計画」を遂行するにあたって、相手方の同意・協力を必要とする研究、個人情報の取り扱いの配慮を必要とする研究、生命倫理・安全対策に対する取組を必要とする研究など法令等に基づく手続が必要な研究が含まれている場合に、どのような対策と措置を講じるのか記入してください。例えば、個人情報を伴うアンケート調査・インタビュー調査、国内外の文化遺産の調査等、提供を受けた試料の使用、侵襲性を伴う研究、ヒト遺伝子解析研究、遺伝子組換え実験、動物実験など、研究機関内外の情報委員会や倫理委員会等における承認手続が必要となる調査・研究・実験などが対象となりますので手続の状況も具体的に記入してください。

なお、該当しない場合には、その旨記入してください。

DC/PD共通 1ページ分

ポイント

－ 正しく書く

- ・ 特に該当しない場合、「該当なし」と書く。
 - － ただし、ちょっとでも違和感を持たれそうな場合には、「○○という理由から該当しない。」と説明する。
 - － 例：生命データの場合
「本研究課題で使用するゲノム情報は全て公開データを用いるため、該当しない。」
- ・ **評点項目ではない**が、該当する場合に適切に記入していないと研究者として悪印象を持たれるのは否めないなのでちゃんと記載する。

4. 【研究遂行力の自己分析】 ※各事項の字数制限はありませんが、全体で2頁に収めてください。様式の変更・追加は不可。

本申請書記載の研究計画を含め、当該分野における(1)「研究に関する自身の強み」及び(2)「今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素」のそれぞれについて、これまで携わった研究活動における経験などを踏まえ、具体的に記入してください。

(※) 本行を含め、以下の斜体で記した説明文は申請書を作成する際には消去してください。

・下記(1)及び(2)の記入にあたっては、例えば、研究における主体性、発想力、問題解決力、知識の幅・深さ、技量、コミュニケーション力、プレゼンテーション力などの観点から、具体的に記入してください。また、観点を項目立てするなど、適宜工夫して記入してください。

なお、研究中断のために生じた研究への影響について、特筆すべき点がある場合には記入してください。

(1) 研究に関する自身の強み

(※) 本行を含め、以下の斜体で記した説明文は申請書を作成する際には消去してください。

・記述の根拠となるこれまでの研究活動の成果物(論文等)も適宜示しながら強みを記入してください。

成果物(論文等)を記入する場合は、それらを同定するに十分な情報を記入してください。

(例) 学術論文(査読の有無を明らかにしてください。査読のある場合、採録決定済のものに限ります。)

著者、題名、掲載誌名、巻号、pp 開始頁-最終頁、発行年を記載してください。

(例) 研究発表(口頭・ポスターの別、査読の有無を明らかにしてください。)

著者、題名、発表した学会名、論文等の番号、場所、月・年を記載してください。(発表予定のものは除く。ただし、発表申し込みが受理されたものは記載してもよい。)

DC/PD共通 2ページ分

これまで「研究遂行能力」を記載していた欄が「研究遂行力の自己分析」に変更。
研究成果の単なる羅列ではなく、申請者の強み・足りないことが分かるように自己分析を加えて記載することが求められる。

4. 【研究遂行力の自己分析】(1) の書き方

下記(1)及び(2)の記入にあたっては、**例えば、研究における主体性、発想力、問題解決力、知識の幅・深さ、技量、コミュニケーション力、プレゼンテーション力などの観点から、具体的に記入してください。**また、**観点を項目立てするなど、適宜工夫して記入してください。**

なお、**研究中断のために生じた研究への影響について、特筆すべき点がある場合には記入してください。**

記述の根拠となるこれまでの研究活動の成果物(論文等)も適宜示しながら強みを記入してください。

成果物(論文等)を記入する場合は、それらを同定するに十分な情報を記入してください。

(例) 学術論文

(例) 研究発表

(1) 研究に関する自身の強み

・研究における主体性

私は高専5年次に初めてバイオインフォマティクス研究に触れ、情報工学の技術で生物学の問題を解決できる可能性に惹かれた。高専では遺伝子発現データの分類に関する研究を、大学～修士課程ではタンパク質間相互作用の計算に関する研究を行ってきたが、周囲の研究者の助言のもと、常に主体的に研究を進めてきた。萌芽的な成果でも研究会や国際会議などで積極的に発表し、専門家との議論を自身の研究に活かす努力をしてきた。査読付き論文は投稿中であるが、査読なしの成果として4件のテクニカルレポート(成果1～4)と8件の学会発表(成果5～12)があり、開発したソフトウェアはソースコードを含めて公開した(成果18)。

・発想力、問題解決力

私が修士課程で主に行ってきた研究(成果1, 5, 6, 10)は、それまで複素関数で表されていた数理モデルを実数のみで表現するというアイデアに基づいており、一見単純ではあるがそれまで行われていた計算のコストを大きく減じることに成功した。さらに、機械学習を組合せる試み(成果2, 7)や、簡易的なエネルギー計算を組合せる試み(成果3, 11, 12)など、アイデアを次々と実行に移して問題解決を図ってきた。このような高い発想力と問題解決力が私の強みであると考えている。

・知識の幅・深さ、技量

バイオインフォマティクス分野は、単に計算手法を知っているだけでは真に重要な生物学の実問題を解くことが難しく、解くべき実問題を見出すためには情報工学と生物学の両者の幅広い知識が必要となる。私はバイオインフォマティクスに出会うまでは情報工学の知識を学ぶことに注力した。高専は学科首席で卒業し(成果15)、関連資格の取得も積極的に行った。高専2年次に基本情報処理技術者試験、高専3年次にソフトウェア開発技術者試験に合格し、高専4年次では文部科学省後援 デジタル技術検定 第31回情報部門1級にトップ合格、文部科学大臣奨励賞を受賞した(成果13)。バイオインフォマティクスの研究に興味を持ったからは、バイオインフォマティクス技術者認定試験に合格するなど、両分野の知識を広く吸収してこうと努めている。実際にタンパク質間相互作用を予測するソフトウェアも開発した(成果18)。原子パラメータの設定部分を除けばC++コードでおよそ3000行ほどの規模であるが、汎用ライブラリ(高速フーリエ変換FFT)の実装を理解して自身のソフトウェアに組み込むなど、プログラム実装に関しても高い技量を有していると考える。また、プログラミング以外にも、例えば制御工学は細胞内ネットワークのモデル化に利用されシステム生物学と深いつながりを持つなど、バイオインフォマティクス研究を進める上で高専～大学で培ってきた広い専門知識は非常に役に立っている。

・コミュニケーション力

研究会等に積極的に参加し、バイオインフォマティクス分野の研究者とのコミュニケーションを積極的に進めてきた。また、同じ研究科の異なる研究室との合同ゼミを通じて、情報工学の他分野の先端知識の習得に努めた。

・プレゼンテーション力

学会等に積極的に演題投稿を行い、プレゼンテーション力の向上に励んできた。プレゼンテーション能力が認められ、3件の学会からの賞(成果14, 16, 17)の受賞に至った。

4. 【研究遂行力の自己分析】(1) の書き方

記述の根拠となるこれまでの**研究活動の成果物（論文等）も適宜示しながら強みを記入してください。**

成果物（論文等）を記入する場合は、それらを同定するに十分な情報を記入してください。

（例）学術論文

（例）研究発表

書いても良さそうなこと

※なんでも書いて良い。判断するのは審査員。

・学術論文

（査読の有無を示す。査読がある場合はacceptedのもののみ。arXivやbioRxiv、medRxivなどのプレプリントサーバに投稿した論文などの査読なし論文を示してもよい）

・研究発表

（口頭・ポスターの別、査読の有無を示す。国際会議と国内学会を分けて示すとよい。招待講演があれば示す）

・学術雑誌における解説や総説、著書等

（査読の有無を示す）

・特許、実用新案、意匠等（出願・取得の別を示す）

・受賞（授与機関・学会、受賞年月を示す）

・外部研究費や奨学金・フェローシップ等の獲得

・公開ソフトウェア（GitHub URL等を示す）

・各種創作物（文芸作品、工芸品、建築物等）

・新聞その他メディアへの発表

成果一学術論文（全て査読なし）

1. **大上雅史**, 松崎裕介, 松崎由理, 佐藤智之, 秋山泰. 物理化学的相互作用の導入による網羅的タンパク質間相互作用予測システムの高精度化, *情報研報*, 2009-BIO-17(11):1-8, 2009.
2. **大上雅史**, 松崎裕介, 松崎由理, 秋山泰. 網羅的タンパク質間相互作用予測システムにおける判別精度の改良, *情報研報*, 2009-BIO-18(3):1-8, 2009.
3. **大上雅史**, 松崎裕介, 松崎由理, 佐藤智之, 秋山泰. リランキングを用いたタンパク質ドッキングの精度向上と網羅的タンパク質間相互作用予測への応用, *情報研報*, 2010-BIO-20(3):1-8, 2010.
4. **大上雅史**, 松崎由理, 松崎裕介, 佐藤智之, 秋山泰. MEGADOCK: 立体構造情報からの網羅的タンパク質間相互作用予測とそのシステム生物学への応用, *情報研報*, 2010-MPS-78(4):1-9, 2010.

成果一国際会議における発表（全てポスター発表・査読なし）

5. **Ohue M.**, Matsuzaki Y, Matsuzaki Y, Akiyama Y. Improvement of all-to-all protein-protein interaction prediction system MEGADOCK, *CBI-KSBSB Joint Conference (Bioinfo2009)*, no.10-101, Korea, Nov 2009.
6. **Ohue M.**, Matsuzaki Y, Matsuzaki Y, Akiyama Y. Improvement of all-to-all protein-protein interaction prediction system MEGADOCK, *The 20th International Conference on Genome Informatics (GIW2009)*, no.033, Kanagawa, Dec 2009.
7. **Ohue M.**, Matsuzaki Y, Matsuzaki Y, Sato T, Akiyama Y. MEGADOCK: An all-to-all protein-protein interaction prediction system: Improving the accuracy using boosting and binding energy reranking, *The 2nd Bio Super Computing Symposium*, no.55, Tokyo, Mar 2010.

成果一国内学会・シンポジウムにおける発表（全て査読なし）

8. **大上雅史**, 越野亮. 決定木による白血病遺伝子の自動分類ルールの抽出, 平成 18 年度電気関係学会北陸支部連合大会, F-57, 石川, 2006 年 9 月. (口頭発表)
9. **大上雅史**, 越野亮. 遺伝子発現データ解析における遺伝子偏差を用いた前処理方法の提案, 第 69 回情報処理学会全国大会, 1M-7, 2007 年 3 月. (口頭発表)
10. **大上雅史**, 物理化学的相互作用の導入によるタンパク質間相互作用予測の高精度化, 第 8 回データ解析融合ワークショップ, 東京, 2009 年 3 月. (口頭発表)
11. **大上雅史**, 松崎裕介, 松崎由理, 佐藤智之, 秋山泰. リランキングを用いたタンパク質ドッキングの精度向上と網羅的タンパク質間相互作用予測への応用, 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM2010), E4-4, 兵庫, 2010 年 3 月. (口頭発表およびポスター発表)
12. **大上雅史**, MEGADOCK における評価関数の改良とリランキングの導入, 第 10 回データ解析融合ワークショップ, 東京, 2010 年 3 月. (口頭発表)

成果一受賞

13. **大上雅史**, デジタル技術検定 1 級情報部門 文部科学大臣奨励賞 受賞, 2006 年 2 月.
14. **大上雅史**, 電子情報通信学会北陸支部 学生優秀論文発表賞 受賞, 2006 年 9 月.
15. **大上雅史**, 石川工業高等専門学校 電子情報工学科 学業成績優秀賞 受賞 (首席卒業), 2007 年 3 月.
16. **大上雅史**, 2009 年情報処理学会バイオ情報学研究会 学生奨励賞 受賞, 2010 年 3 月.
17. **大上雅史**, 第 2 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム 学生奨励賞 受賞, 2010 年 3 月.

成果一公開ソフトウェア

18. タンパク質剛体ドッキングソフトウェア MEGADOCK <https://www.bi.cs.titech.ac.jp/megadock/>

まずは中身を見る

4. 【研究遂行力の自己分析】(1) の書き方 (業績の数が少ない人向け)

- ・ 学術雑誌等に発表した論文 (全て査読有り)

成果に対して解説を付すと良い。

1. Ohue M, Suzuki SD, Akiyama Y. Learning-to-rank technique based on ignoring meaningless ranking orders between compounds, *J Mol Graph Model*, Elsevier, **92**: 192-200, 2019.

本論文では、ウェブマイニングや情報検索の分野で用いられるランク学習 (Learning-to-Rank) のテクニックを、薬剤候補化合物の選別問題に応用し、高活性が期待できる化合物を精度よく選別することに成功した。化合物に適用するために新たにSPDRankと呼ばれる新しいランク学習手法を開発して用いた。提案手法であるSPDRankはソースコードレベルで公開した。申請者は筆頭著者としてSPDRank法の提案や実装、評価を行い、共著者との議論を経て論文執筆を行った。

論文の場合、自分が何をやったか示すことで遂行能力が示せる。

(自分が主体的にやったことをアピール、でも共著者を蔑ろにはしない。)

2. ...

自分の名前は下線や太字にしておくとうい
(指示はされていないが、審査員が見つけやすい)

4. 【研究遂行力の自己分析】(2) の書き方

下記(1)及び(2)の記入にあたっては、例えば、**研究における主体性、発想力、問題解決力、知識の幅・深さ、技量、コミュニケーション力、プレゼンテーション力などの観点から、具体的に記入してください。**また、**観点を項目立てするなど、適宜工夫して記入してください。**

(2) 今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素

私は、異分野の研究者とのコミュニケーションを取るための能力、さらに高度なプログラミング技能などを含む課題解決能力、成果を発表するための表現能力の3つの要素が、今後更なる発展のために必要と考えている。以下にその理由を述べる。

要素1 異分野の研究者とのコミュニケーションを取るための能力

バイオインフォマティクスの研究を始めてから学会等で専門家とのコミュニケーションに励んでいるが、十分ではないと感じている。生物物理若手の会や生化学若い研究者の会などの学生・若手研究者コミュニティにも参加し、生物学の言葉を肌で理解し、より深いコミュニケーションを取れるようになることが重要である。

要素2 さらに高度なプログラミング技能などを含む課題解決能力

東工大のスパコン TSUBAME や理研の「京」に代表される大規模な計算環境をフルに活用するためには、MPI実装やCUDAによるGPUプログラミングの技能が必要となる。プログラミング技能も含め、今後計算機やデータの大規模化によって必要となる技術は刷新されていくため、求められる課題に対して適切に道具を選べるよう技術・知識のアップデートを欠かさないことが重要である。

要素3 成果を発表するための表現能力

何度か国際会議に参加した経験から、英語で成果を表現する能力に難があると感じている。語学力を向上させ、また国際論文誌への論文投稿や国際会議での発表を積極的に行うことで、表現能力を身につけて国際的に活躍する研究者を目指すことが重要である。

4. 【研究遂行力の自己分析】(2) の書き方 → 5. 【目指す研究者像】とのつながりを意識

5. 【目指す研究者像等】 ※各事項の字数制限はありませんが、全体で1頁に収めてください。様式の変更・追加は不可
日本学術振興会特別研究員制度は、我が国の学術研究の将来を担う創造性に富んだ研究者の養成・確保に資することを目的としています。この目的に鑑み、(1)「目指す研究者像」、(2)「目指す研究者像に向けて特別研究員の採用期間中に行う研究活動の位置づけ」を記入してください。

4. 【研究遂行力の自己分析】(2) 今後研究者として更なる発展のために必要と考えている要素

5. 【目指す研究者像等】(2) 目指す研究者像に向けて特別研究員の採用期間中に行う研究活動の位置づけ

書くことの雰囲気似ている！？

大上の考えるおすすめ構成 (※こう書かなきゃいけないというわけではありません)

目指す研究者像

5. (1)で書く



**目指す研究者像に対して
自分に足りないこと**

4. (2)で書く



**DC/PDの研究活動を通じて
目指す研究者像に近づく**

5. (2)で書く



まずは中身を見る

5. 【目指す研究者像等】 ※各事項の字数制限はありませんが、全体で1頁に収めてください。様式の変更・追加は不可
日本学術振興会特別研究員制度は、我が国の学術研究の将来を担う創造性に富んだ研究者の養成・確保に資することを目的としています。
この目的に鑑み、(1)「目指す研究者像」、(2)「目指す研究者像に向けて特別研究員の採用期間中に行う研究活動の位置づけ」を記入してください。

DC/PD共通 1 ページ分

ポイント

- 具体的に書く
 - 具体的なエピソード、人物像、研究者を目指すきっかけ
 - 身に付けるべき（と自分が思っている）資質
＝自分に足りないこと＝**4.で記載したことと対応する**
- （一般論として）研究者には**アウトリーチ***が求められる
←たぶんみんな書く気がするのであまり差別化にはならない...

※**アウトリーチ** 国民の研究活動・科学技術への興味や関心を高め、かつ国民との双方向的な対話を通じて国民のニーズを研究者が共有するため、研究者自身が国民一般に対して行う双方向的なコミュニケーション活動

5. 【目指す研究者像等】 ※各事項の字数制限はありませんが、全体で1頁に収めてください。
様式の変更・追加は不可

日本学術振興会特別研究員制度は、我が国の学術研究の将来を担う創造性に富んだ研究者の養成・確保に資することを目的としています。この目的に鑑み、(1)「目指す研究者像」、(2)「目指す研究者像に向けて特別研究員の採用期間中に行う研究活動の位置づけ」を記入してください。

志望動機や理想の研究者像では差がつきにくい...

→何を具体的にやると宣言するかが重要

- ・ 研究活動（論文、学会発表）
- ・ 横の活動＝学会・若手の会・学内企画 等
- ・ 縦の活動＝後進の育成 等
- ・ アウトリーチ活動

(1) 目指す研究者像 ※目指す研究者像に向けて身に付けるべき資質も含め記入してください。

私は中学時代より計算機に興味を持っており、石川工業高等専門学校 電子情報工学科に入学した。高校1年から学べる専門性の高い授業に感動し、また講義と研究を両立して行う先生方の姿を見て、いつしか自分も最先端の研究をしながら、それを学生へ、社会へと伝えられる研究者になりたいと思うようになった。

高専では5年次に卒業研究を行うことになる。私の配属先の研究室では人工知能や機械学習・最適化理論などを扱っていたが、そこで紹介して頂いたパイオインフォマティクスという分野に大きな興味を抱いた。計算機によって生命の神秘が解明でき、不治の病を治せるようになるかもしれない。私は幼少期から喘息に苦しめられていたこともあって、それまで生物学にはほとんど触れてこなかった身ではあるが是非とも取り組んでみたいと思い、研究テーマを決めた。実際に研究を始めてみるとパイオインフォマティクスという学問の難しさを知った。生物学の深い知識が当然ながら必要であり、自分のあまりの無知ぶりに愕然とした。白血病患者の遺伝子発現量データから機械学習の手法で病態判別を行う問題に取り組んでいたが、疾病に関する知識は付け焼き刃で、なんとか1年で一定の成果を出すことはできたが決して満足のいくものではなかった。もっと多くの知識を身につけて研究に挑戦したいと思い、編入先の東京工業大学でもパイオインフォマティクスが研究できる研究室の配属を希望した。大規模並列計算機が自由に使える恵まれた環境での研究活動はとても新鮮であり、申請者はタンパク質間相互作用の研究に没頭することができた。また、生物学の言葉と情報工学の言葉の両方を使いこなす周囲の研究者の存在は、私への大きな刺激となった。

修士課程を踏まえて、特別研究員としてタンパク質間相互作用予測についての研究を進めようとしていたが、将来的にはゲノム情報科学や薬物動態学など他のパイオインフォマティクスの応用分野にも視野に入れた研究を行いたいと思っている。単に自分の知的欲求を満たすというだけではなく、喘息治療薬やガン治療薬などの開発などに繋がる可能性を夢見ている。社会に成果を広めるためには、自らの研究を一般の人にも広く知ってもらうことが必要だと思っており、そのためには、研究内容を明快に説明する力や、応用領域での実践力といった資質を身につけるべきであると考えている。将来はアカデミックポストを目指しており、研究活動のみに留まらず、アウトリーチの工夫や教育活動にも力を入れたいと考えている。最先端の学際研究を展開しつつ、学生へ、社会へと伝えられる研究者、成果を社会へ還元できる研究者を目指したい。

(2) 上記の「目指す研究者像」に向けて、特別研究員の採用期間中に行う研究活動の位置づけ

特別研究員の採用期間中の研究活動を通じて、p.8 に挙げた 今後研究者として更なる発展のため必要と考えている3つの要素を習得し、最先端の学際研究成果を社会へ伝える研究者を目指す。そのために、研究成果は査読付き国際論文誌または査読付き国際会議フルペーパーとして出版し、国際会議での発表も積極的に実施する。本研究の計画には盛り込んでいないが、生物学分野のコミュニティにも積極的に足を運び、本研究に関連するPPIの共同研究が実施できることが理想である。

研究内容を明快に説明する力や、応用領域での実践力といった資質を身につけるべきであると考えているが、本研究で掲げたPPI予測という事例は単なる1つの例に過ぎない。特別研究員としての研究活動を通じて実応用領域で求められる課題に対して適切に道具を選べるような技術・知識を身に付け、情報工学をバックグラウンドとしながらも自ら生物学の重要な課題に切り込める学際研究者として活躍するための、重要なステップを担う3年間として本研究活動を位置づける。

まずは中身を見る

・ 申請書で書くこと

2. 【研究計画】

- ・ 研究の位置づけ
- ・ 研究目的・内容等
- ・ 受入研究室の選定理由（PDのみ）

3. 人権の保護及び法令等の遵守への対応

4. 【研究遂行力の自己分析】

- ・ 研究に関する自身の強み
- ・ 今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素

5. 【目指す研究者像】

- ・ 目指す研究者像
- ・ 目指す研究者像に向けて特別研究員の採用期間中に行う研究活動の位置づけ



まずは中身を見る

Q. これまでの研究には触れない？

- 令和4年度から「これまでの研究」についての記述欄が消滅
 - これまでに成し得た研究成果・業績よりも、これから何をしようと思っているのかという未来の話に大きく重心が移った
- だからといって、**これまでやったことにまったく触れないのは勿体無い**
 - 『2.【研究計画】(1) 研究の位置づけ』で着想に至った経緯として、これまでの研究の存在があった
 - 当該分野の状況を語る際に、すでに自身の研究が最先端であるといったケースもあるはず
 - 『4.【研究遂行力の自己分析】』でも、もちろんこれまでの研究に触れる
 - 今まで研究をやってきたからこそその理想の『5.【目指す研究者像】』がある
- 明示的には「これまでの研究」という欄はないが、**実際には「これまでの研究」について触れるべき欄はたくさんある**
- 自分の**「これから」を説得力をもって訴えるために、**
今一度自分の「これまで」について振り返ってみよう

一番大事なタイトル（研究課題名）

- ・「タイトルは一番短いアブストラクト」
- ・40字以内で簡潔明瞭なタイトルを付ける
- ・どんなタイトルをつければ良い？→先人に学ぶ

The screenshot shows the KAKEN research database homepage. At the top, the word "KAKEN" is displayed in large blue letters, followed by the text "研究課題をさがす" (Find research topics) and "科学研究費助成事業データベース" (Research Fee Grant-in-Aid Database). Below this, a dark blue box contains a paragraph of text explaining the database's content. At the bottom of the page, there is a search bar with the placeholder text "フリーワード" (Free word), a "検索" (Search) button, and a "▼ 詳細検索" (▼ Detailed search) link. A small checkbox labeled "全文検索" (Full-text search) is also visible.

KAKEN 研究課題をさがす
科学研究費助成事業データベース

科学研究費助成事業データベースは、文部科学省および日本学術振興会が交付する科学研究費助成事業により行われた研究の当初採択時のデータ（採択課題）、研究成果の概要（研究実施状況報告書、研究実績報告書、研究成果報告書概要）、研究成果報告書及び自己評価報告書を収録したデータベースです。科学研究費助成事業は全ての学問領域にわたって幅広く交付されていますので、本データベースにより、我が国における全分野の最新の研究情報について検索することができます。

フリーワード

検索

■ 全文検索

▼ 詳細検索

<https://kaken.nii.ac.jp/>

KAKEN DBのおすすめ検索方法

2. 伝わる申請書にする

「特別研究員奨励費」

(+ 若手研究や基盤研究(C))

特別研究員奨励費

こっちはDC1/DC2/PD等

こっちはフツウの科研費種目

(他にも色々あるが、金額がでかいとタイトルが壮大になる傾向。)

☐ 補助金 ☐ 基金 ☐ 一部基金

総合系/情報学/情報学フロンティア/生命・健康・医療情報学 OR 理工系/総合理工/計算科学/計算科学 OR 生物系/生物学/生物科学/生物物理学

自分の分野に近そうなもの

2010

古すぎても微妙なので、とりあえず2018年以降など

1. トリプルネガティブ乳癌の予後不良バイオマーカーの同定と効果的治療法の確立

研究種目 若手研究(B)
研究分野 生命・健康・医療情報学
腫瘍治療学
研究機関 聖マリアンナ医科大学
研究代表者 皆川 貴美乃 聖マリアンナ医科大学, 医学部, 助教
研究期間 (年度) 2017-04-01 - 2020-03-31 交付
キーワード バイオインフォマティクス

2. 幹細胞/バンクネットワーク構築と統合情報検索システムの開発

研究種目 若手研究(B)
研究分野 生命・健康・医療情報学
研究機関 京都大学
研究代表者 桜井 都衣 京都大学, IPS細胞研究所, 特定研究員
研究期間 (年度) 2017-04-01 - 2019-03-31 交付
キーワード バイオインフォマティクス / 幹細胞/バンクネットワーク / データベース

3. ゲノム環境ワイド関連解析GE-WASによる遺伝子環境相互作用の同定

出てきたタイトルや
キーワードなどを参考にする

「●●●による●●の開発と●●」

「●●●による●●の●●」

みたいなパターンが多い?

私が優秀であることを伝えたい

こんなに良い研究計画なんだ、

こんなに研究成果があるんだ、

こんなアイデア見たことないでしょ、

こんなに今まで頑張ってきたんだ、、、



書類が山積みの中、忙しそうに仕事をしている男性のイラストです。

- 審査員は1人で**数十人分の書類を読む**

- 本業の片手間なので時間を使えない

→まずぱっと見て「こいつは有望そう」か
そうでないかをフィルタリングする（と思われる）

- 箸にも棒にもかからないグループに行ってしまったらもう読まれることはほとんどない

- 箸か棒にかかるためには

- 最初のページをなんとかする**



研究背景 タンパク質間相互作用 (Protein-Protein Interaction: PPI) の理解は、細胞システムの理解や創薬に重要な課題であり、計算機による網羅的予測手法の確立が求められている。PPI とは、生体内のタンパク質分子が互いに結合することによって機能の促進・抑制や新たな機能獲得をする現象であり、細胞内では数万種類存在するといわれるタンパク質が相互にどのような制御関係にあるかを理解することが、病気のメカニズムの解明や創薬に重要な課題である。しかし、タンパク質の相互作用を網羅的に予測することは、現在では非常に難しいとされている。そこで、本プロジェクトでは、タンパク質の相互作用を予測するための計算機モデルを開発し、タンパク質の相互作用を網羅的に予測することを目指す。本プロジェクトの成果は、タンパク質の相互作用の理解に大きく貢献するものと考えられる。

大上が最初に書いた DC1申請書 1ページ目

研究背景 タンパク質間相互作用 (Protein-Protein Interaction: PPI) の理解は、細胞システムの理解や構造ベース創薬に重要な課題であり、計算機による網羅的予測手法の確立が求められている。PPI とは、生体内のタンパク質分子が互いに結合することによって機能の促進・抑制や新たな機能獲得をする現象であり、ヒト細胞内では数万種類存在するといわれるタンパク質が相互にどのような制御関係にあるかを理解することが、病因

大上が最初に書いた

DC1申請書 1 ページ目

造のデータは日々蓄積されており、現在公開データベースに6万件を超える登録があるが、PPI予測の研究においては未だ十分な活用をされているとは言えず、構造情報を用いた予測手法の開発が求められている。本研究では、多数の立体構造情報を用いた網羅的PPI予測手法の考案に先立ち、高速に計算可能なタンパク質ドッキングシステムMEGADOCKの開発を行い、大規模なPPI予測に応用していくことを目的とする。

手法 タンパク質構造を計算機で扱う場合、分子動力学などの精密な手法は1組のタンパク質ペアの解析に数日ほどの計算時間が必要となるため、本研究の目的とする多対多の解析は非現実的であるという問題がある。本研究では比較的计算量の小さい、形状相補性に基づくタンパク質ドッキングを用いることで解決を図った。しかし、既存のドッキングソフトウェアである ZDOCK は、ドッキング計算の研究には広く用いられていたが、本研究の想定するような大規模計算には向かない計算時間のかかるものであった。その理由は評価関数にあり、ZDOCK は個別のタンパク質ペアのドッキング部位予測の精度向上を目的として、表面形状以外にも様々な物理化学的相互作用を考慮した複雑な評価関数を用いていた。本研究では、新たに real Pairwise Shape Complementarity (rPSC) とよばれる評価関数を提案した [1]。ZDOCK の形状相補性評価関数は複素数で表現されていたが、rPSC は全体を実数のみで構成した評価関数である。rPSC の利点は、余った虚数項に他の物理化学的相互作用の評価関数を導入しても、ドッキング計算時の評価関数の積和畳み込みの際に用いる複素 FFT の回数を増やす必要がなく、大幅な計算時間の削減が可能となる点である。MEGADOCK はさらに静電的相互作用を評価関数として複素項に加え、形状相補性と静電的相互作用を1回のFFTによって同時に評価できるようにした。

これまでの成果 ZDOCKの研究グループが公開している Protein-Protein Benchmark 2.0 のモノマー同士の 44 個の複合体構造ベンチマークデータを用いた MEGADOCK によるドッキング予測を行った。予測精度では ZDOCK に若干劣るものの、計算速度は ZDOCK の 4 倍を記録し、評価値が最も高いと出力された予測複合体の構造も、44 個中が正解構造に近いもの (RMSD < 5 Å) であった。また、同じ 44 個のベンチマークデータに対して 44×44 の総当たりドッキングを行い、そのドッキング評価値からタンパク質ペアの親和性評価を行った。親和性の評価には、ドッキングの最大評価値を用いた閾値による判定法 [1]、ドッキング評価値やタンパク質構造情報を特徴量とした機械学習による判別法 [2] などを考案したが、最終的にはドッキング予測構造のクラスターリングと結合エネルギー計算を併用した閾値判定法 [3] が最も良いとの結論を得、適合率と再現率の調和平均である F 値で表すとその精度は 0.415 であり、ランダムな予測よりも有意に優れていることを示した。

さらに、MEGADOCK の実用的な性能を示すためにシステム生物学における典型的な問題である細菌

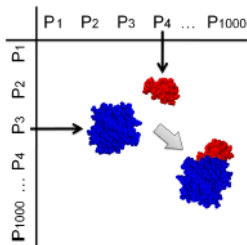


図 1: 網羅的 PPI 予測の概略

■研究の背景

申請者は計算機を用いて生命科学の問題を解くバイオインフォマティクスの研究を行っており、特にタンパク質間相互作用 (Protein-Protein Interaction: PPI) の大規模計算による予測という問題に取り組んできた。PPIとは、生体内のタンパク質が互いに結合することによって、機能の促進・抑制や新たな機能の獲得、制御関係にある[1]。特に

大上が提出した

DC1申請書 1 ページ目

大上が提出した DC1申請書 1 ページ目

けており、実験コストは増加する一方であるため、計算機による PPI 予測手法、特に多数のタンパク質群の網羅的な PPI 予測 (図 1) への期待が高まっている [2]。

■ 問題点

計算機による従来の PPI 予測手法における問題点を挙げる。

1. タンパク質配列情報に基づいた手法や、既知の相互作用情報に基づいた手法が主なものであったが、これらの手法は相互作用時に形成される複合体構造を考慮していない。
2. 構造情報を扱うべく、分子動力学法などの分子シミュレーション手法を利用した PPI 予測手法も提案されていたが、分子動力学法では 1 組のタンパク質ペアに対する計算だけで数日から数週間の時間を要するため、多くのタンパク質間での PPI の予測に利用するのは現実的ではない。
3. タンパク質を剛体と仮定した形状の相補性に基づくドッキング計算を用いることで計算時間を削減することができる。代表的なソフトウェアにマサチューセッツ大の Weng らが開発した ZDOCK [3] があり、1 組のペアの予測が数時間レベルで与える。しかしこの計算時間では、網羅的な PPI 予測に利用するにはまだ現実的ではない。

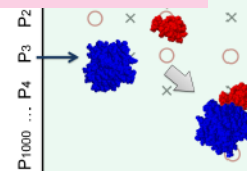


図 1: 網羅的 PPI 予測の概略

■ 解決方策

ドッキング計算を1ペアにつき1時間程度に抑えることができれば、多数のタンパク質群の、立体構造情報に基づいた網羅的PPI予測が実施可能となる。

■研究目的・研究方法

本研究では、タンパク質構造情報に基づく大規模なPPI予測を行うためのシステムであるMEGADOCKの開発を行うことを目的とする。

■特色と独創的な点

- タンパク質の立体構造情報を活用した PPI 予測手法である点
- 高速なタンパク質ドッキング計算によって、網羅的 PPI 予測を実現する点
- 相互作用の有無だけではなく複合体構造の予測も含まれており、実験生物学者へより詳細な相互作用の可能性を提案することができる点

■これまでの成果

従来は複素数で表現されていた形状相補性のスコアモデルに対して、実数のみで表現した新たな形状相補性のスコアモデルである **real Pairwise Shape Complementarity (rPSC)** モデルを考案 [4] し、MEGADOCK に実装した。これにより、ベンチマークデータ (protein-protein docking benchmark 2.0) を利用したドッキング予測精度では、ZDOCK とほぼ同等の精度を維持しつつ、ZDOCK の約 4 倍の計算速度を記録した。

あなたが優秀であることを伝える

・ポイント

– 言われた通りの構成

– 最初のページを特に工夫

- 図、箇条書き、太字、下線、改行位置、配置

読みにくい改行を
できるだけ避ける

本研究では、運動方程式に基づいた分子動力学シミュレーション技法を用いて、**CDK2タンパク質の細胞内動態を推定する。**

– 参考文献を適切に引用

- 審査員が「申請者に研究者としての能力があるかどうか」を見る指標となっている

– これでもかと、業績アピール

- 業績は「4. 【研究遂行力の自己分析】」以外でもアピール
- (特にDCは)投稿中の論文は参考文献欄に書けるので書いておく
 - ついでに「5. 【目指す研究者像】」でも触れて良い。

とにかく読みやすい書類作り

- **デザインに少しこだわってみる（フォントや色など）**
 - 重要なところは太字（ゴシック体）
 - モノクロで，カラフルに
 - 本文に下線をつけて，下線のとこだけ読むと全体が掴めるというテクニックもある
 - 本文：MS明朝 + Times New Roman、
太字箇所：MSゴシック + Arial が基本
 - $\text{\TeX}$ でも書けます（→科研費LaTeX）
 - アレンジは個人の自由
- **インパクトのある概要図を載せる**
 - ひと目で全体の概要が掴めるようにする
 - 白黒で作る

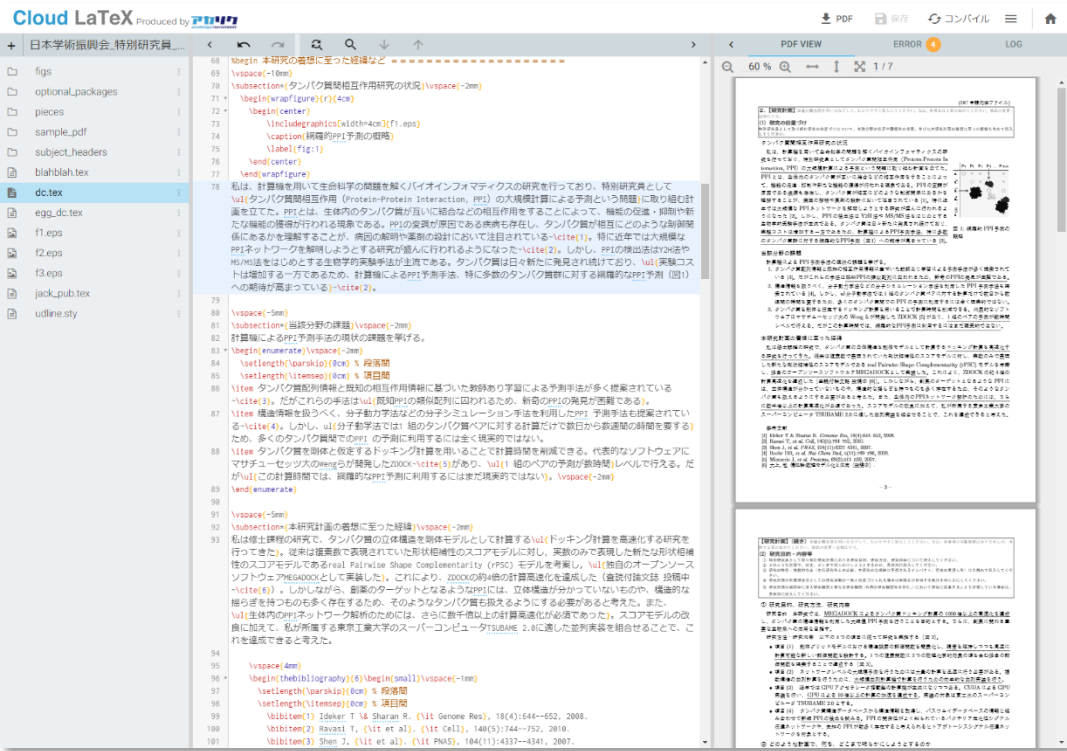
科研費LaTeX = TeXで学振申請書を書くためのスタイルファイル群

<http://osksn2.hep.sci.osaka-u.ac.jp/~taku/kakenhiLaTeX/>

TeXの環境構築は（慣れてないと）割と大変
→ ウェブ上のオンラインエディターが無料で利用できる

- Overleaf（有名）
- **Cloud LaTeX**（あまり知られてないが、学振・科研費にも標準対応）

<https://cloudlatex.io>



テンプレートから作成

- + 日本学術振興会_海外特別研究員
- + 日本学術振興会_海外特別研究員(RRA)
- 日本学術振興会_特別研究員DC

科研費
LaTeX

2022(R04)年度(2021年春応募分)
by 科研費LaTeX updated
2021.02.12
<http://osksn2.hep.sci.osaka-u.ac.jp/~taku/kakenhiLaTeX/>

作成

- + 日本学術振興会_特別研究員_PD
- + 日本学術振興会_特別研究員_RPD
- + 日本機械学会
- + 日本語プレゼン(Beamer)

とにかく読みやすい書類作り

・文章のスタイル例

重要な箇所は**太字** (MSゴシックなど)

重要な箇所は**太字＋下線**

重要な箇所は**太字＋黒バック**

普通のところもゴシック基調で**重要な箇所は太字**

UDフォントを活用し、**重要な箇所は太字**

※UDフォント＝ユニバーサルデザインフォント (UD デジタル 教科書体 NP-Rや BIZ UDPゴシックなど)。普通のフォントに比べて視認性が高い。

・テクニックの一例

－ 専門用語っぽい語句には**枕詞**をつけて分かった気にさせる

フィンガープリントを用いて標的の分かっている類似化合物を検索

 薬剤の**1次元情報**である**フィンガープリント**を用いて
標的の分かっている類似化合物を検索

● 読みやすさを追求するチェックリスト



- 言われた通りの構成になっていますか？
- 専門用語だらけになっていませんか？
- 1文1文が長すぎていませんか？主語述語はありますか？
- 文字のサイズが小さすぎていませんか？
 - ・ 指定では最低10pt. せめて10.5pt以上, できれば11pt.
 - ・ **図の中の文字**も同じ. 小さくなり過ぎないように
- 研究内容が伝わる図がありますか？
- 白黒印刷向けに作っていますか？
- 本文中の文献引用などの表記スタイルは揃っていますか？
- インデントや字下げは意味のあるものになっていますか？

審査員に訴える書類作り

・書類審査には質疑応答が無い

- **あたりまえ。**だがこの事実をちゃんと気にしているか？
- 審査員が疑問に思う点に対して弁明するチャンスが無い
- **疑問に思いそうなことは、先打ちで言及しておく**
 - ・「何を使って／どうやってやるの？」
 - ・「なんでこの実験方法／手法を選んだの？」
 - ・「手順はそれでいいの？この方法はなんでやらないの？」
 - ・「うまくいかなかったらどうするの？おしまい？」
 - ・「他に似たような研究はやられてないの？」
 - ・「壮大な計画だけど本当にできるの？」
 - ・「何ができたらできたと言えるの？」
 - ・ **誤解されたらおしまい。**誤解されないような日本語にする。
- 学会発表の練習と同じ。想定問答を自分で考える。
 - ・ 具体的に記載してください という指示の理由
 - ・ 「もっと良い○○という研究／結果が出てるよ」は致命傷。
有名論文含め広くサーベイしておくことが大事（独創性の主張にも繋がる）

審査員に訴える書類作り

● 審査員に訴求するチェックリスト

- アイデアが面白いことを示せているか
- 着想に至った経緯が説明できているか
- 先行研究等の違いをきちんと示せているか
- 研究計画に独創性があるか
- 研究背景、問題提起、提案に至る一連の説明が論理的にできているか
- 具体的で実現できそうな研究計画を示せているか
- 先行研究が十分に示されており、自身の研究の優位性が示せているか
- 提案する課題が研究分野にどの程度の影響をもたらすかを過大過小なく検討できているか
- 困難があった場合に解決する方法を考えているか
(指導教員や周囲の研究者とのコミュニケーションも含む)
- 対外的な活動やアウトリーチなどの経験
- これまでの研究実績等、研究に関する強みがあるか
- 申請者の分担を示せているか (1人でやるならそう明記する)
- 自身の弱みを把握し、克服しようとしているか
- 目指す研究者像と、そこに至るために必要な要素を挙げられているか



申請に必要なもの

※PDの場合（DCは評価書は1名分だけ）

	項目名	作成者	作成方法	ダウンロード	見本
	申請者全員				
	見本	申請書情報	申請者	システムに入力	
	様式	申請内容ファイル（※1）	申請者	様式に記入し システムにアップロード	 
▶	見本	評価書1	採用後の受入研究者	システムに入力	
▶	見本	評価書2	申請者の研究をよく理解している研究者	システムに入力	
	見本	特別研究員奨励費応募調書	申請者	システムに入力	
	希望者のみ				
	様式	「⑧学歴、⑨博士学位取得機関の 情報、⑩研究・職歴等別紙」 （※1）	申請者	様式に記入し システムにアップロード	 
	見本	特例措置希望理由書	申請者	システムに入力	

• 評価書を用意する

- DCは1人分, PDは2人分
- 指導教員が書く ← **Web上で**
 - 幸運なケース：指導教員が全部書いてくれる？
 - 不運なケース：自分で書けと言われる？（現実⇄）
- **指導教員はあなたのことを全て知っているわけではない**
 - あなたの学部時代、高校時代、幼少期、趣味嗜好、特技、一芸、アルバイト、サークル、研究エピソード、学会発表、等々、、、
 - **指導教員の先生に「素材」を提供してあげましょう。
おいしく料理してくれます！**
 - PDの場合、2人の評価書の内容が似すぎないように異なる料理用の素材を用意できるとベター
 - 大上の例
 - 評価書A（指導教員）：研究の学問的観点を強調、身近な事例・趣味等
 - 評価書B（受入教員）：スパコン利用者としての観点や創薬応用



評価書の内容

- 申請者の(1)「研究者としての強み」及び(2)「今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素」のそれぞれについて、具体的に入力してください。
(例えば、研究における主体性、発想力、問題解決力、知識の幅・深さ、技量、コミュニケーション力、プレゼンテーション力などの観点から、具体的に記入)
((1), (2)それぞれ1000字以内かつ25行以下) (DC/PD共通)
「4.【研究遂行力の自己分析】と同じ！」
- 申請者の**研究者としての将来性を判断する上で特に参考になると思われる事項**について。(例：特に優れた学業成績、受賞歴、飛び級入学、留学経験、特色ある学外活動など。)
(2000字以内かつ60行以下) (DCのみ)
- 申請者を受け入れるに当たっての「**受入(指導)計画**」, 受入研究者自身又は研究室で行っている研究と**申請者の研究との関連性, 期待される相乗効果**について。
(申請者の研究の発展性だけでなく、申請者を受け入れることにより期待される、受入研究者(研究室)の研究に対する影響、波及効果についても明記。)
(2000字以内かつ60行以下) (PDの評価者1のみ)

評価書作成者向け体験版 - JSPS 電子申請システム

http://www.shinsei.jsps.go.jp/topyousei/yousei_taiken/hyokasha/input_token.html

④申請者の(1)「研究者としての強み」及び(2)「今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素」のそれぞれについて、具体的に入力してください。 (1) 及び (2) の記入にあたっては、例えば、研究における主体性、発想力、問題解決能力、知識の幅・深さ、技量、コミュニケーション能力、プレゼンテーション能力などの観点から、具体的に記入してください。 Please give specific descriptions on the applicant's strong points as a researcher (1) and indicate an area for improvement to advance his/her research career (2). Regarding the applicant's research work, please take the following viewpoints into consideration and describe the items (1) and (2) concretely. 1. Independence 2. Creativity 3. Problem solving skills 4. Expertise level 5. Technical skills 6. Communication skills 7. Presentation skills
* (1) 研究者としての強み The applicant's strong points as a researcher 最大2000バイト（全角1000文字）まで入力可能です。 また、「入力行数」の値が25以下になるように調整してください。 なお、「入力文字数（半角含む）」と入力行数はPDFに変換した際に入力した内容が規定の枠内に収まるための目安です。そのため「入力文字数（半角含む）」と「入力行数」の値が上記の値以下でもエラーとなる場合がございます。

・ 評価書サンプルファイルを作ろう

－ 指導教員が書きやすいように

日本学術振興会特別研究員 DC1 申請者に関する評価書

評価書作成者 麹町 次郎 所属 ○○大学 大学院○○○研究科 准教授

申請者 学振 太郎 申請者との関係 現在の受入研究者

申請者の(1)「研究者としての強み」及び(2)「今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素」のそれぞれについて、具体的に入力してください。
(例えば、研究における主体性、発想力、問題解決力、知識の幅・深さ、技量、コミュニケーション力、プレゼンテーション力などの観点から、具体的に記入)

(1) 研究者としての強み (全角1000字以内かつ25行以下)

(以下草案)
主体性: 学振太郎は顔画像認識を高速化するための新規数値モデルの開発に取り組んできた。
発想力: 中高大と部活動で続けてきたテニスの写真判定技術(ホークアイ)をきっかけに、動画像認識の数値モデル改良を思い付いた。
知識の幅・深さ、技量: 画像認識の最先端知識、GPU プログラミングの技術、数学と画像処理の境界領域への挑戦
コミュニケーション力: 学部時代は電機屋販売員のアルバイトで接客技術と商売トークを身につけた。ゼミや共同研究の打ち合わせなども積極的に参加。
プレゼンテーション力: 研究室配属後は学会での口頭発表を3回行い、M1のときに第○回○○学会の学生発表賞を受賞した。計5回学会発表(3回口頭発表、2回ポスター発表)。
その他: TA 頑張ってます。M1で発表賞とりました。学部の成績は上位でした。先輩の面倒見も良い方だと思います。祖父が大学教授でした。

(2) 今後研究者として更なる発展のため必要と考えている要素 (全角1000字以内かつ25行以下)

(以下草案)
・ 数学(情報幾何)に関する知識が足りない
・ サーベイする力が足りていない
・ 英語で表現する力が足りない
・ 意見を否定されたときに感情が出る
・ 昼夜逆転しがち
・ 徹夜しがち

申請者の研究者としての将来性を判断する上で特に参考になると思われる事項について。
(例: 特に優れた学業成績、受賞歴、飛び級入学、留学経験、特色ある学外活動など。)

(全角2000字以内かつ60行以下)
(以下草案)
上にも書いたが、計4回学会発表(3回口頭発表、1回ポスター発表)し、賞も取った。
・ 情報処理学会全国大会(2019)、電気関係学会支部大会(2019)、...
高校時代、テニスの県大会上位入賞経験あり
一応学部の成績は上位

Web上の指示を
転記しておく

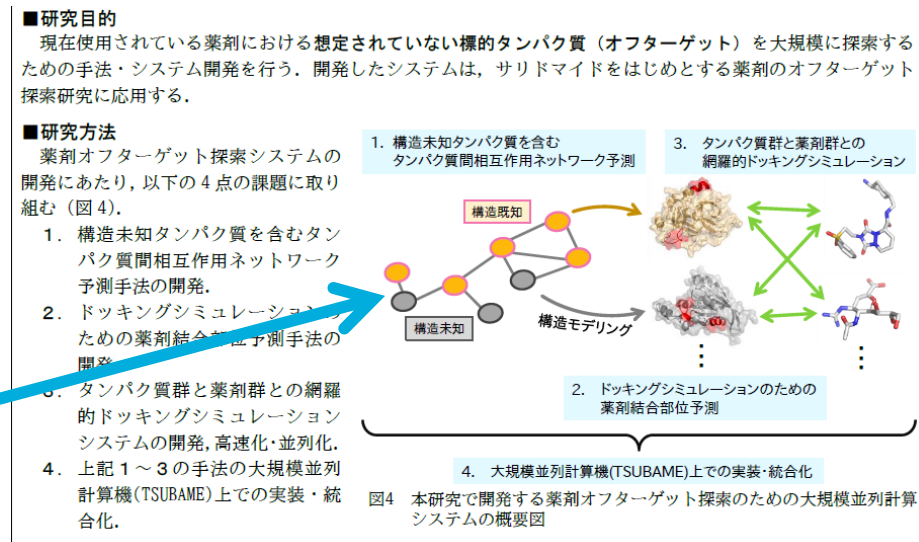
あらかじめ推しポイントを
自画自賛で書いておく

「強み／必要と考えている要素」は
4.【研究遂行力の自己分析】と同じ！
＝申請書も見せて相談する

とにかく読みやすい書類作り

- **最初はコピペでも良いから埋め、たくさん推敲する**
 - 1回全部埋めてから指導教員と相談するのが良い
 - できてないものを指摘するのは大変だが、
見た目でそこそこできているものに駄目出しするのは比較的簡単
- **色んな人に読んでもらおう**
 - 読むのはその分野の素人かもしれない
 - 素人が読んででも内容が理解できる程度に分かりやすく

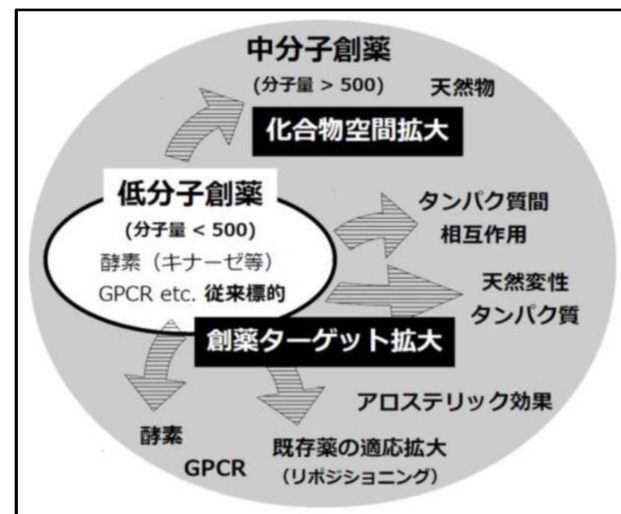
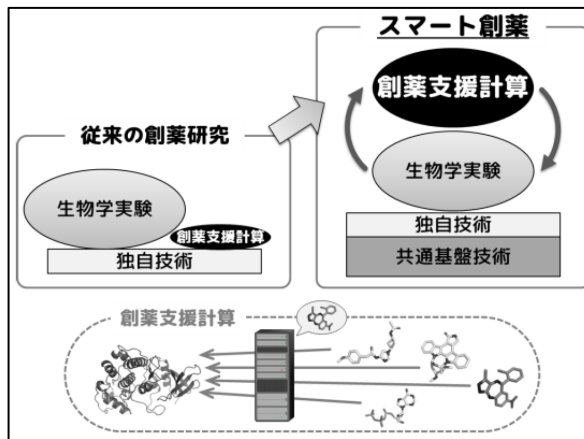
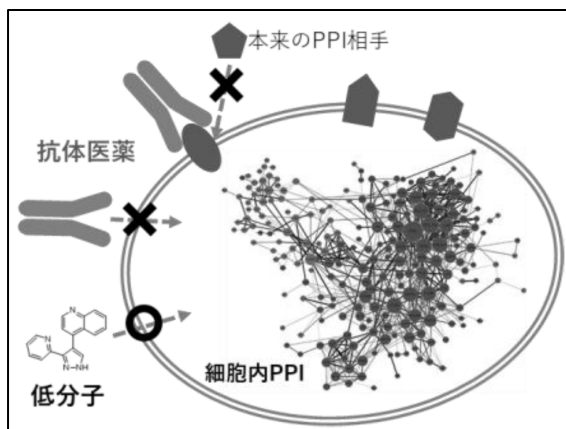
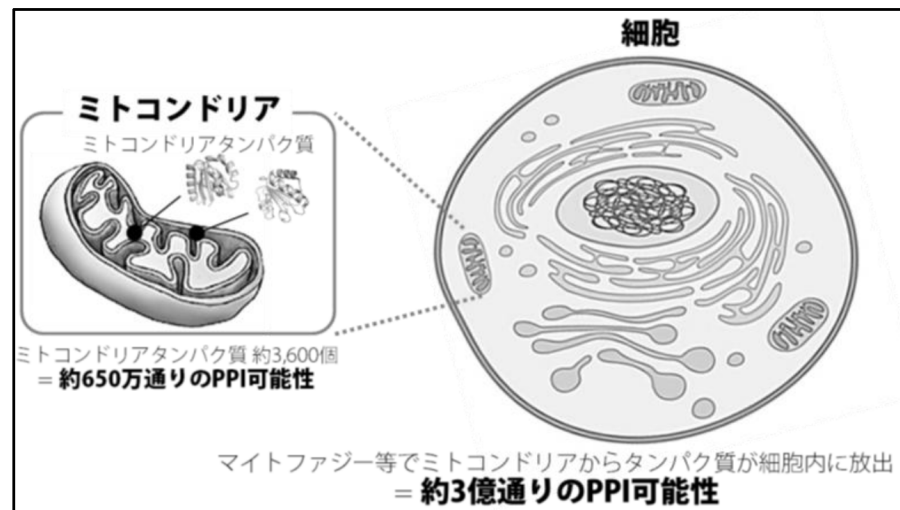
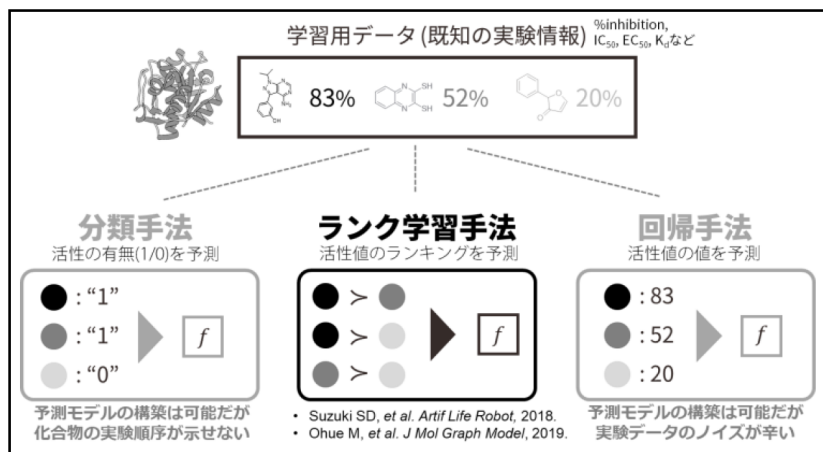
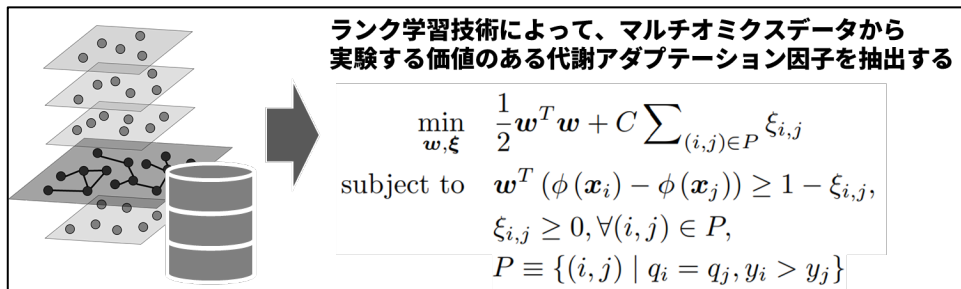
図でパッと見て
何をする研究か分かると良い



大上がこれまで作った「図1」

(ほとんど科研費ですが)

2. 伝わる申請書にする



夢は大きく、根は深く

- ・ プロが読むので大層なことを言っても現実はバレるが、それでもある程度夢を語りたい
 - バランスが重要、ドラえもんは作れない
- ・ **実現可能性をアピール**
 - ただし3年(2年)計画じゃないと達成できない程度のインパクトを持つ若々しい挑戦を掲げる

大上DC1申請書

「本研究はタンパク質構造を扱う構造生物学と、生物をシステムとして理解するシステム生物学とをつなぐ架け橋となり得るものであり、PPI研究のパラダイムシフトを起こすものであると自負する。」

大上PD申請書

「本研究の完成によって、これまで未解明であった薬効の作用機序の解明を、計算機を用いて行うことが可能となる。既存の薬剤はもちろん、新規薬剤候補化合物の設計にも本研究のシステムを用いることができ、あらゆる疾病に対する創薬研究に利用できる計算機スクリーニング手法として、本研究は高い有用性を持つ。」