

日時:10月29日(水) 11:30-13:00

会場:タワーホール船堀 平安(2階)

LSKB による情報のランキング

株式会社ワールドフュージョン

川原 弘三

緑川 淳

「探索」をキーワードにした時、メディカルリサーチと創薬探索ではテーマは異なってくるが、標的タンパク質のランキングを行いたいという目的は同じである。

遺伝子発現実験で求めた遺伝子グループを機能や創薬標的かどうかなどといった調査を行い、更なるステップに移行していく。

そこで必要となるのがさまざまな情報を最適化して利用する事である。遺伝子からの標的探索と化合物からの標的探索という異なるチャンネルから見た時に、どのように情報を利用すればよいかを紹介する。

バイオロジーの研究テーマから見た時、実験データとして出てくる情報はマイクロアレイや NGS による発現データや変異情報である。今回の紹介ではその発現データから活性値を利用した化合物候補の探索や、機能による標的タンパク質のランキング。更にこれら実験から出てくるデータには探索を重ねるたびに多くのナリッジが追加される。このような内部で作られたナリッジをどのように管理していくかを LSKB の機能を使って紹介する。

創薬研究において、日々積み重なる化合物の評価データや結晶構造を登録管理することで、検索時に その標的に対する種々の公共データを比較参照できる。

化合物構造と標的タンパク質の情報が整理されることで、構造はその特徴を標的タンパク質の相互作用に結びつけることが可能になり、また、標的タンパク質はタンパク質分類での同じクラス同じ機能の一部として、タンパク質 と化合物の相互作用を解析し、新たな知見が得ることにつながる。

その一例として LSKB は新たに標的予測機能を搭載し、構造から取得できる情報が広がった。今回 この統合データを利用した解析例や Pipeline Pilot や Muse Invent などのソフトウェアとの連携事例を紹介する。

LSKB Life Science Knowledge Bank

Chemicalgenomics

Integration of Public Resources and In-house Data

The LSKB (Life Science Knowledge Bank) is an information powerhouse that accelerates new drug discovery and functional genomics research. The core technologies are annotation management, data analysis, integration of public data, and management of in house knowledge. LSKB also continually grows and improves every four months with software updates.

For chemists, LSKB provides a chemical index containing 60 million non-redundant chemical structures, and links information such as pharmacological actions, target proteins, protein binding ligands, bioassays, activities, etc., within our unique search system.

For biologists, it offers quick access to data on genes, diseases, tissues, and genomes. It also offers microarray support tools, annotation, and built-in statistical analysis processing for NGS and microarray data or data mining for locating target proteins. There are also a variety of data management tools for experiments, phenotypes, and annotations—important features for genome based studies.



LSKB is one of few databases in the world that can perform searches by protein function and by chemical structure

Simplified, Accessible Information from Multiple Sources at Your Fingertips

LSKB provides annotation information about genes, proteins, compounds and their structures, assay activities, and direct links to scientific publications and literature. Within just a few clicks, you have access to comprehensive data on 60 million chemical compounds and information painstakingly gathered, organized and reviewed from 60 public databases, related to genomes, compounds, diseases, and organs. The data are separated by human, mouse, rat, and zebrafish.

The user is empowered with a variety of search and analysis functions to perform a multitude of tasks, including predicting the functions of proteins and compounds, searching existing literature & publications, and predicting the functionality from a single, or from multiple, chemical structures.

LSKB consists of two main parts. One is called "BIO Knowledge", which includes the database, functions, and tools for gene and genome research. The other part is the "Chem Knowledge", focusing on drug discovery and chemical research. LSKB always provides you with the information between chemicals and genes, proteins, and diseases. This system creates a bridge connecting information between the world of the chemist and the biologist.