

日時：10月29日 12:00-13:30

会場：タワーホール船堀 401（4階）

## Knowledgeによる疾患標的探索と既存薬の再検証

株式会社ワールドフュージョン  
川原 弘三  
緑川 淳

創薬研究をしていく上で、効率化を求められていく一方で、新しい創薬ターゲットの減少 国内臨床試験の空洞化など様々な要因により、医薬品開発は厳しさを増し、国際的にも FDA の新薬承認数の減少がおきている。とはいえ、既存薬の新効能での承認は徐々に増加するなど、Drug Repositioning や Phenotypic assay など 旧来の手段、既存薬剤と 新しい技術の融合により、薬剤開発の幅が広がっている。また、遺伝子解析が進んだことで疾患関連遺伝子、SNP など創薬に直結する多くの情報が非常に早いスピードで得られるようになってきた。一億を超えた CAS Number の登録にみられるよう加速して増え続ける化合物数と 積み重なる化合物と標的とのアッセイ・活性情報に加え、化合物から薬になる段階で重要な 特許情報、臨床開発状況も徐々にアクセスしやすくなってきた。しかしながら、特許情報から ターゲットや活性値の取得、開発状況から欲しい情報だけを取得することは 容易ではない。

知識データベースは 増え続ける情報を解析し蓄積したものであり、Drug Repositioning や On/Off Target の予測など 創薬における様々な課題を整理して提示することが可能である。また、着目する疾患領域から、希少疾患のリストアップや、疾患の臨床開発状況、既知の文献情報、関連遺伝子、タンパク質、SNP、遺伝子発現情報、関連タンパク質のアッセイ情報やその活性化合物と活性値などを短時間で示すことや、アミノ酸変異を伴う SNP の影響を知るために、PDB が既知の場合、リガンド周囲に影響する場合の構造情報を確認することも可能だ。日常的に標的遺伝子やタンパク質から取り組んでいる 創薬研究者には遺伝子やタンパク質から 活性化合物やアッセイ情報同様に関連疾患および希少疾患を提示し、ターゲットの推測を支援する。さらに 次世代シーケンサーを用いた解析結果から創薬標的を探するための優先順位付手法など、実験データから有望なターゲットを、実験値を考慮しながら選択していくことが可能である。創薬の場面に即した利用例を実際の動作とともに紹介する。

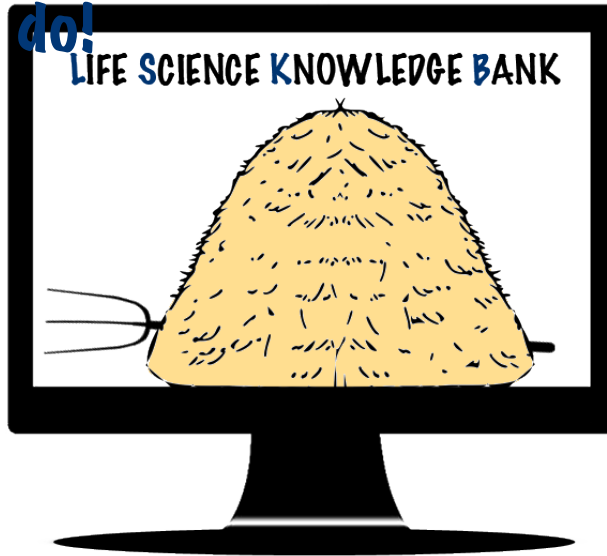
# LSKB: Life Science Knowledge Bank

The only application that offers complete biological & chemical research databases interconnected as one.

Frustrated with online research?



Let LSKB find it, you have better things to do!



Comprehensive Research Knowledge Base & Data Management System



[www.w-fusion.com](http://www.w-fusion.com)

[oshirase@w-fusion.com](mailto:oshirase@w-fusion.com)