

バイオインフォマティクスとその医学応用
第4回 オミックス解析における実務者意見交換会
Bioinformatics and Its Applications in Medicine /
The Fourth Working Group Meeting on Omics-based Analysis

開催趣旨:

近年、オミックス研究のなかでも、包括的なタンパク質間相互作用（インタラクトーム）の情報を活用した研究が活発に進められている。特に、既存の薬剤を他の疾患に適用拡大する「ドラッグリポジショニング」研究は、創薬コストを削減する上で、非常に期待されている。今回のフォーカストセッションでは、立体構造をもとにタンパク質相互作用を大規模に予測する計算プラットフォーム、およびドラッグリポジショニング研究についての最新のトピックをご紹介いただき、また、バイオインフォマティクスとその医学応用の分野のポスター発表から関連するライトニングトークをいただき、会場の皆様とブレインストーミングを行う場を提供したい。

モデレーター: 茂樺 薫 Kaoru Mogushi 順天堂大学 難病の診断と治療研究センター

Intractable Disease Research Center, Juntendo University

神田 将和 Masakazu Kohda

埼玉医科大学 ゲノム医学研究センタートランスレーショナルリサーチ

Division of Translational Research, Research Center for Genomic Medicine, Saitama Medical University

1. ライトニングトーク**(1) P3-01 Generation of Amino Acid Indices to Distinguish Two Peptide Groups**

宮木 理帆 Riho Miyaki

関西学院大学理工学部生命医化学科

Department of Biomedical Chemistry, School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University

(2) P3-02 Network-based Analysis of Glycosyltransferase and Protein Interaction

里山 翔吾 Shogo Satoyama

関西学院大学 Kwansei Gakuin University

2. 構造情報に基づくタンパク質間相互作用予測システム MEGADOCK

大上 雅史 Masahito Ohue

東京工業大学 情報理工学院 School of Computing, Tokyo Institute of Technology

タンパク質間相互作用(PPI)の網羅的解明は、疾病要因の解明や新規薬剤設計などの一助となるが、10万種超(ヒト)のタンパク質の組み合わせを網羅的に実験で検証することは不可能に等しい。我々は計算による PPI 予測に着目し、近年蓄積が加速するタンパク質立体構造情報を活用した予測技術“MEGADOCK”を開発してきた。MEGADOCK は「京」や Tsubame 上での並列計算が可能で、現在は Microsoft Azure クラウドで必要な分を必要なだけセキュアに計算できる枠組みや、直感的に操作が可能な GUI クライアント、蓄積された膨大な計算結果を閲覧できる Web インターフェースなどの開発を進めている。MEGADOCK の仕組みや EGFR シグナル伝達系への応用事例を紹介するとともに、オミックス研究への PPI 予測情報の活用について議論したい。

3. 生体分子間相互作用ネットワークの情報を用いたドラッグリポジショニングの可能性について

長谷 武志 Takeshi Hase

特定非営利活動法人 システム・バイオロジー研究機構 The Systems Biology Institute

理化学研究所・統合生命医科学研究センター・疾患システムモデリング研究グループ

RIKEN Center for Integrative Medical Sciences Laboratory for Disease Systems Modeling

ドラッグリポジショニングは、既存薬(または、開発が途中で中止された化合物)に対して、未知の作用を明らかにし、新しい適応疾患を見つける手法である。既存薬はヒトに対する安全性が確認されているため、ドラッグリポジショニングは、開発効率の改善(開発期間の削減など)の手段として期待を集めている。ところで、近年、テキストマイニングやハイスループットな実験技術により、網羅的な生体分子間相互作用ネットワーク(タンパク質間相互作用ネットワーク、薬剤・標的分子間ネットワーク、薬剤・薬剤間相互作用ネットワークなど)の情報が蓄積されつつある。これらのネットワークの情報は、生体内における分子間の関係性を記述したものであり、ドラッグリポジショニングについて、システム的な視点からの理解を助けるための有用なリソースとなりつつある。本セッションでは、生体分子間相互作用ネットワークの情報を用いたドラッグリポジショニングの可能性について議論したい。