

生命情報データベースの高度化・標準化

第Ⅱ期研究開発課題

○課題名：ホヤプロテイン統合データベースの構築

代表研究者：稲葉一男（筑波大学下田臨海実験センター）

K-1

CIPROにおけるタンパク質間相互作用可視化プログラムの開発

上野恵介、峯田克彦、遠藤俊徳

（北海道大学大学院情報科学研究科）

タンパク質間相互作用の解析はポストゲノムにおける中心的課題の一つである。しかしながら、ゲノム解読に比べ、タンパク質間相互作用の情報は特定の生物種に限定的である。ホヤプロテイン統合データベース（CIPRO）はホヤタンパク質に特化した実験データ及び、機能アノテーションを収載したデータベースである。本研究では、CIPROにおけるホヤタンパク質について、既存のタンパク質間相互作用データベースに対する相同性検索を行い、Eadesのバネモデルによる力学モデルを採用した、Webを介してインタラクティブに操作できるプログラムを開発した。さらに、既存のタンパク質間相互作用データベースのタンパク質について、他生物種に対する相同性検索を行い、既存のタンパク質間相互作用データと融合することで、ある特定の相互作用のグラフについて、生物種間でレイヤーを切り替えて表示する機能を追加した。これらのインターフェイスを介して、タンパク質間相互作用を力学として捉え、他の機能アノテーションと連携した、表示、動きなどの効果で認識することにより、特徴的な機能モジュールについての直観的な理解が得られることが期待される。

○課題名：ゲノムと環境の統合解析による生命システムの機能解読 (KEGG)

代表研究者：金久實（京都大学化学研究所）

K-2

KEGG MEDICUS: 疾患・医薬品の分子ネットワーク情報リソース

金久實^{1,2}、田辺麻央^{1,3}、平川美夏^{1,3}、渡辺真理²、緒方麻紀子²、木内ふみ²

（1 京都大学化学研究所、2 東京大学医科学研究所、3 科学技術振興機構）

日常的な病気のほとんどは様々な遺伝因子と環境因子が複雑に絡み合った多因子性疾患である。KEGG MEDICUSはこれら因子を含む分子ネットワークと疾患との関連解析を可能にするKEGGの新しいリソースで、疾患を分子ネットワークのゆらぎ状態（KEGG DISEASE）として、医薬品を分子ネットワークへのゆらぎ物質（KEGG DRUG）としてデータベース化を行っている。疾患情報では、分子ネットワークが比較的解明されている、がん、免疫疾患、神経変性疾患、循環器疾患などはパスウェイマップで、病因遺伝子が既知の多くの疾患は遺伝子・分子リストという形で表現し、ハイスループットデータと統合処理が可能なリソースを開発した。医薬品情報では、日本のすべての医療用・一般用医薬品（生薬等も含む）、米国、欧州の医療用医薬品を化学構造と成分の観点で一元的に集積した。さらに標的、薬物代謝酵素、他の薬との相互作用などの分子ネットワークと、微生物や植物の天然物合成経路と医薬品開発における構造展開の歴史を反映した化学構造変換の分子ネットワークに関する知識集約を行っている。医薬品開発の新しい戦略を提供できると考えている。