

2014年度 中央大学共同研究費 ー研究報告書ー

研究代表者	所属機関	理工学部		2014年度助成額
	氏名	田口 善弘		2,700 (千円)
	NAME	Y-h. Taguchi		
研究課題名	和文	FAMS を用いたタンパク質機能予測に基づく DrugDiscovery	研究期間	2013年度 ～2015年度
	英文	Drug Discovery based upon protein function prediction using FAMS		

1. 研究組織

	研究代表者及び研究分担者		役割分担	備考
	氏名	所属機関/部局/職		
1	田口 善弘	中央大学・理工学部・教授	研究統括・遺伝子選択・FAMS を用いた構造予測	研究代表者
2	M. Michael Gromiha	IIT Madras・生物工学科・准教授	タンパク・DNA ハイブリディング予測	研究分担者
3	内古閑 伸之	中央大学・理工学部・助教C	タンパク質複合体結合予測	研究分担者
4	岩館 満雄	中央大学・理工学部・准教授	各種計算のハイスループット実行	研究分担者
5	梅山 秀明	北里大学・名誉教授、中央大学理工学部共同研究員	FAMS およびインシリコスクリーニング技術の開発	研究分担者
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
合計		5 名		

2. 研究の概要（背景・目的・研究計画・内容および成果 和文 1000 字程度、英文 100word 程度）

（和文）

本研究計画はインシリコスクリーニングで創薬するパイプラインを構築することにある。そのため、遺伝子発現データなどのオミックスデータから疾病原因遺伝子を特定し、遺伝子からタンパク質の立体構造を推定し、推定した立体構造に合致する化合物をコンピューターでスクリーニングすることで創薬を行う。2014年度は以下の活動を行った。

・2014年6月：並列生物情報処理イニシアティブ（IPAB）が主催する、第1回 IPAB コンテスト：「コンピューターで薬のタネを創る」に参加し、標的遺伝子の阻害剤候補を提出した。提出結果は IPAB 側で実験的に検証され、見事に一個の阻害剤を当てることができた。

・2014年5月 アカデミックフォーラム（東京都江東区・ビッグサイト）にて本共同研究プロジェクトの成果について発表を行うと共にブースを構え、来場者に研究成果をアピールした。

・2014年8月 国際会議 InCoB2014（オーストラリア・シドニー）に研究論文を投稿し、採択され口頭発表を行った。なお、同論文は同会議において Best Paper Award を授与された。

・2014年10月 BioJapan（パシフィック横浜）に於いて企業との共同研究を模索するため、研究発表を行うと共に23社とミーティングを行って、外部資金獲得のために努力を行った。

なお、実際に研究を行った対象は以下の通りである

・小細胞肺癌セルラインのリプログラム実験の遺伝子発現・プロモーターメチル化解析を行い、薬物候補となる化合物を特定して提案した。

・小細胞肺癌セルラインの転移組織化実験の遺伝子発現・プロモーターメチル化解析を行い、薬物候補となる化合物を特定して提案した（上記 Best Paper Award 受賞研究）。

・心的外傷後ストレス障害由来の心臓疾患（マウスによる実験）の遺伝子発現・マイクロ RNA 発現データの解析を行い、薬物候補となる化合物を特定して提案した。

・アレルギー・がんなど広範の疾患の原因遺伝子である SYK 対象の薬物となる化合物を探索し、発表した

・本研究計画で開発した遺伝子探索手法である「主成分分析を用いた教師なし学習による変数選択」について招待解説論文を執筆し、書籍の1部として刊行した。

（英文）

The aim of this project is to develop *in silico* drug discovery pipeline using omics data set. In this year, we attended the drug discovery contest managed by Initiative for Parallel Bioinformatics (IPAB) and identified drug candidate compounds. We attended Academic forum (Big sight, Tokyo) and appealed achievement of our project to several companies. We also applied InCob2014 (Sidney, Australia) and our paper was accepted and awarded as best paper awards. We attended BioJapan2014 where we have organized meetings with 23 companied to aim to receive external funds from these companies. The disease we dealt with included non-small cell lung cancer, posttraumatic stress disorder mediated heart diseases, and SYK gene that are related to cancer and inflammatory diseases.

3. おもな発表論文等（予定を含む）

【学術論文】（著者名、論文題目、誌名、査読の有無、巻号、頁、発行年月）
<ul style="list-style-type: none"> ・ S. Ishida, H. Umeyama, M. Iwadate, and YH Taguchi, Bioinformatic screening of autoimmune disease genes and protein structure prediction with FAMS for drug discovery Protein Pept Lett (査読有) 21 巻 8 号 pp.823-39, 2014/8
<ul style="list-style-type: none"> ・ H. Umeyama, M. Iwadate, Y-H Taguchi, TINAGL1 and B3GALNT1 are potential therapy target genes to suppress metastasis in non-small cell lung cancer, BMC Genomics, (査読有) 15 巻付録 9 号 S2, 2014/12 Best Paper Award
<ul style="list-style-type: none"> ・ H. Umeyama, M. Iwadate, Y-H Taguchi, In silico spleen tyrosine kinase inhibitor screening by chooseLD, IPSJ SIG technical reports, (査読無) 2015-BIO-41 巻,9 号,pp.1-6 2015/3/20
【学会発表】（発表者名、発表題目、学会名、開催地、開催年月）
<ul style="list-style-type: none"> ・ Y-h. Taguchi, Integrative Analysis of Gene Expression and Promoter Methylation during Reprogramming of a Non-Small-Cell Lung Cancer Cell Line Using Principal Component Analysis-Based Unsupervised Feature Extraction, ICIC2014, 中国、 2014/8/ 3—6
<ul style="list-style-type: none"> ・ Y-h. Taguchi, TINAGL1 and B3GALNT1 are potential therapy target genes to suppress metastasis in non-small cell lung cancer, InCoB2014, オーストラリア、 2014/7/31—8/ 2
<ul style="list-style-type: none"> ・ Y-h. Taguchi, In silico spleen tyrosine kinase inhibitor screening by chooseLD 情報処理学会バイオ情報学、北海道、2015/3/20 他多数
【図 書】（著者名、出版社名、書名、刊行年）
<p>YH Taguchi, M. Iwadate, H. Umeyama, Y. Murakami, A. Okamoto, <i>Heuristic Principal Component Analysis-Based Unsupervised Feature Extraction and Its Application to Bioinformatics</i>, in “Big Data Analytics in Bioinformatics and Healthcare”, IGI Global, 2014</p>
招待解説論文
【その他】（知的財産権、ニュースリリース等）
なし