

2015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		2015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	In silico drug discovery using FAMS on protein function inference		

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	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
3	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
4	M. Michael Gromiha	IIT Madras・生物工学科・准教授	タンパク・DNA バイndeイング予測	学外研究分担者
5	梅山 秀明	北里大学・名誉教授	FAMS およびインシリコスクリーニング技術の開発	学外研究分担者
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
合計		5 名		

2. 2015年度の研究活動報告

(和文)

当初(申請時)は、①自己免疫疾患関連遺伝子で見出したリガンドについてインシリコスクリーニングを行う。このために計算機を購入する。②老化関連遺伝子、肝炎/肝がん関連遺伝子、常在菌感染症原因菌の遺伝子について FAMS を用いた立体構造を予測する。以上が2015年度の計画であったが、これらは難しいことが2013年度、2014年度時点でわかっていたためすでに当該年度でこれらのテーマは実現不可能であるとして断念しており、これらの研究は行わず、胆管がん・肝臓がんにおける mRNA, miRNA、メタボロームの発現解析、ALS の原因遺伝子の探索、世代間エピジェネティックスの遺伝子解析、非小細胞肺がんの現遺伝子の解明、キナーゼの阻害剤探索を行った。これらはいずれもインシリコ創薬に直接・間接に関係するものであり、研究の大枠を外してはいない。本年度の成果は以下のとおりである。①6月には IBISML (沖縄) において、9月(東京)、12月(京都)、2016年3月(金沢)には SIGBIO において研究発表を行った。②JSBi2015 においては論文がハイライトトラックに選ばれ講演を行った。③TBC2015, GIW/InCoB2015 においては講演・論文が採択され、また、刊行された (TBC2015 については刊行予定) ④イノベーションジャパン展示会に採択され、2日間に渡って講演を行った。⑤バイオアカデミックフォーラム、BioJapan2015 の2つの展示会にブース参加、講演を行い、多数の企業・団体と面談を行い (バイオアカデミックフォーラムでは3社、BioJapan2015 においては40社(この数は全出展者中2位))、共同研究の可能性を探った(残念ながら現在のところ共同研究に至った例は無い)。⑤構成員の一人であるグロミハ教授がインドで行ったワークショップに、同じく構成員の一人である内古閑助教と共に招待され、招待講演を行った。内古閑助教の貢献は創薬に於いて重要なたんぱく質複合体の構造予測の改良である。⑥この他、以下の研究集会に参加してポスターによる研究発表を行った (NGS 現場の会、科研費新領域シンポジウム(公募班として参加)、理化学研究所 QBIC 研究会、理化学研究所エピジェネティクス研究会、JSBi2015)。⑦IPAB の企画による「第2回 IPAB コンテスト: 『コンピュータで薬のタネを創る2』」に田口・岩館・梅山・グロミハが参加し、グロミハ教授が優秀賞を獲得した。グロミハ教授の貢献はキナーゼ阻害剤のインシリコ創薬において阻害性能の高い阻害剤の発見に貢献した部分である。以上のように当初の研究計画とは異なってしまったが、他の研究テーマについて学術的かつ産業応用的に十分な研究活動を行い、実績を上げることができた。

(英文)

We have presented our research projects at IBISML, and three SIGBIO workshops (Oral). Our papers were accepted at two international conferences (GIW/InCob2015, TBC2015) and published (or in press) as peer reviewed papers. Our project was also accepted in Innovation Japan 2015 (Exhibition). We also attended two exhibitions (Academic Forum and BioJapan) and made communications with more than 40 companies/institutes. Taguchi and Uchikoga was invited to workshop organized by Prof. Gromiha. Workshops where posters were presented include, NGS workshop, Sparse modeling project, Riken workshops, JSBi2015. We also attended IPAB organized drug discovery contest and Prof. Gromiha was awarded. We believed that our project achieved good enough outcomes from both academic and application point of views.

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)

Taguchi YH, Iwadate M, Umeyama H Principal component analysis-based unsupervised feature extraction applied to in silico drug discovery for posttraumatic stress disorder-mediated heart disease. BMC Bioinformatics. 16:139 2015/4 ; Uga M, Dan I, Dan H, Kyutoku Y, Taguchi YH, Watanabe E Exploring effective multiplicity in multichannel functional near-infrared spectroscopy using eigenvalues of correlation matrices. Neurophotonics.2015 2(1):015002 2015/4; Murakami Y, Kubo S, Tamori A, Itami S, Kawamura E Iwaisako K, Ikeda K, Kawada N, Ochiya T, Taguchi YH Comprehensive transcriptome and metabolome analysis in Intrahepatic Cholangiocarcinoma and Hepatocellular Carcinoma. Sci Rep. 5:16294,2015/11; Chiba S Ikeda K, Ishida T, Gromiha MM, Taguchi YH, Iwadate M, Umeyama H et al Identification of potential, inhibitors based on compound proposal contest: Tyrosine-protein kinase Yes as a target. Sci Rep. 2015/12; 5:17209; Taguchi YH, Identification of aberrant gene expression associated with aberrant promoter methylation in primordial germ cells between E13 and E16 rat F3 generation vinclozolin lineage. BMC Bioinformatics. 16 Suppl 18: S16 2015/12 (全て査読有)

【学会発表】(発表者名、発表題目、学会名、開催地、開催年月)

田口善弘,岩館満雄,梅山 秀明 非小細胞肺がんのエピジェネティック療法標的遺伝子の推定
情報処理学会バイオ情報学研究会 金沢 2016年3月; Nobuyuki Uchikoga, Analysis of protein docking decoys in terms of physicochemical properties of protein interaction surfaces using rigid-body docking process, 3rdIIT Madras -Tokyo Tech Joint Symposium on "Algorithms and Applications of Bioinformatics", インド、2015年11月; 田口善弘 FAMS と

chooseLD を用いたインシリコ創薬パイプライン, BioJapan2015, 横浜, 2015 年 10 月 ;
Y-h. Taguchi, Principal component analysis based unsupervised feature extraction applied to budding yeast temporally periodic gene expression, HD3-2015 京都, 2015 年 12 月 ;
【図 書】(著者名、出版社名、書名、刊行年)
なし
【その他】(知的財産権、ニュースリリース等) なし
なし