

講習会概要

ゲノムやタンパク質のコンピュータ解析は、シミュレーションと情報検索に大別することができます。得られる情報の増大により、いずれの分野も活発に研究が進むとともに、大変複雑になってきています。本講習会では、特に情報検索に特化し、どのような情報がデータベース検索によって得られるのかを、実際にデータベースにアクセスしながら講習します。当該分野に興味がある学生から研究者まで、様々な方々のオンライン参加を歓迎します。

講習会要旨

■ 13:35 - :

VaProS-BINDS の紹介と実習：VaProS-BINDS は BINDS で開発されている、複数のデータベースから知識を発見することをめざしたアプリケーションです。様々なデータベースを同時検索し、その結果をユーザにまとめて見せることで、ユーザは複雑な操作から解放され、考えることに集中できます。本講習会では、具体的な検索を通して、VaProS-BINDS の使い方を実演します。

■ 14:30 - : 川端 猛 (大阪大学蛋白質研究所・特任准教授)

HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索・モデリング実習：タンパク質が他の分子と結合した複合体の立体構造は、その分子機能の理解やアミノ酸変異の影響を考える上で有用です。HOMCOS は、PDB データベースに登録された複合体立体構造をアミノ酸配列や化学構造から検索し、類似構造を鋳型にしてモデリングを行うためのサーバです。他のタンパク質や低分子化合物との複合体の検索と、簡易なモデリングの実習を行っていただきます。

■ 15:30 -

Drug Target Excavator (DTX)による創薬ターゲット探索：DTX は既知の疾患-疾患関連(原因)遺伝子産物-ドラッグターゲットタンパク質-ドラッグの分子ネットワークのデータベースであり、32,452 件のノード(疾患・ドラッグ・タンパク質)、および 279,889 件のエッジ(タンパク質相互作用・転写調節・疾患関連性・ドラッグ相互作用)の情報を含んでいます。DTX により疾患とドラッグの間を「繋ぐ」分子間相互作用パスを簡便に検索することができます。本講習会では、DTX を用いた疾患-ドラッグパスの解析について解説し、いくつかの例を用いた簡単な実習形式で DTX の使いかたを体験して頂きます。

■ 16:30 - : 木下賢吾 (東北大学大学院・教授)

Natural Ligand DB(NLDB)の紹介と実習：NLDB は、KEGG パスウェイ中の代謝反応に係わるタンパク質構造と低分子複合体のデータベースです。創薬を念頭にヒトに特化しています。また、個別化創薬に向けてゲノム変異をタンパク質構造にマップした結果も提供しています。本講習会では NLDB の内容と使い方を解説します。また、我々が開発した変異のタンパク質構造へのマッピング手法は、日本人マルチオミックス参照パネル(jMorp)でも利用されているので、関連するデータベースとして簡単に紹介します。