

31-1018

ゲノム創薬のためのバイオインフォマティクス手法の開発

○奥野 恭史¹, 藪内 弘昭¹, 辻本 豪三¹ (¹京大院薬)

【目的】ポストゲノム時代と呼ばれる今日、ゲノム情報をもとにした創薬（ゲノム創薬）研究に大きな期待がよせられている。しかしながら、個々の遺伝子-薬物間の関係が徐々に明らかになってきているものの、膨大なゲノム情報および化学物質情報の関連性について網羅的に扱った研究は未だ皆無に等しい。そこで本研究において、遺伝子やタンパク質の情報と化学物質情報とをゲノムスケールで結びつけるためのバイオインフォマティクスとケモインフォマティクスの融合手法の開発を行った。本手法は、ケミカルゲノミクス・ゲノム創薬の基盤技術になり得るものと期待できる。

【方法】Pubmed データベースを用い、化合物と遺伝子のキーワードの共起性を定義することにより、関連性の強い遺伝子-化合物ペアを情報学的に抽出した。さらにはゲノムとの相関性に基づく化合物類似性を新しく定義し、既存の化学特性との相関を検証した。

【結果および考察】生体機能関連性を反映するケミカルゲノム統合ネットワークを構築することにより、遺伝子群との相関に基づく化合物の新しい類似性を定義することに成功した。これにより、化学構造や化学特性から定義されてきたこれまでの化合物多様性とは異なる「遺伝子情報に基づく化合物多様性」の定義が可能になるものと期待される。またさらに、1薬物：1標的タンパク質を基本に進められてきたこれまでの創薬研究とは異なる、薬物：関連遺伝子群（ネットワーク）を対象にした新たな創薬開発（ネットワーク創薬）の実現につながり得る。本研究の成果は、今後我々が手にするであろう莫大なケミカルゲノミクス情報を創薬研究へと展開させていくために必要不可欠な知見を提供するものと考えている。