

26PE-am142

GLIDA: ケミカルゲノミクスに基づくドラッグ探索のためのGPCR-リガンド相互作用解析データベース

○多門 啓子¹, 藪内 弘昭², 新島 聡², 箕輪 洋介³, 外村 孝一郎², 国本 亮², 馮 春來², 奥野 恭史² (1三井情報株式会社, 2京大院薬, 3医薬基盤研)

【背景・目的】Gタンパク質共役型受容体 (GPCR) は創薬ターゲットとして重要視されているにもかかわらず、GPCR とリガンドの相互作用関係に着目した情報は十分に提供されていない。また、膨大な量の生物学的情報・化学的情報から創薬にとって有用な知見を効率的に得るためには、1つのプラットフォームより双方の情報を統合的にマイニングする必要がある。そこで我々は、GPCR をターゲットとするドラッグデザインの一助となることを目的に、GPCR とリガンドを同時に探索し相互作用情報を包括的に解析できるデータベース『GLIDA (GPCR-LIgand DAtabase)』の開発を行った。

【方法】GPCR の生物学的情報・リガンドの化学的情報・GPCR とリガンドの相互作用情報を抽出し、リレーショナルデータベースを構築した。ユーザーの利便性を考え、GPCR・リガンドどちらからでも検索可能な Web インタフェースを設けた。GPCR は GPCRDB のクラス分類に従い、リガンドは構成要素の主成分分析によるクラスターリングを行い、クラスごとの検索を可能にした。さらに、検索対象に類似した GPCR 群 (もしくはリガンド群) と相互作用するリガンド群 (もしくは GPCR 群) を二次元マップに描画する機能を実装した。

【結果・考察】GLIDA は、簡単な操作と視覚的に理解しやすい結果画面を提供している。結果画面より繰り返し関連情報を探索できるため、検索対象の周辺の情報を追跡していくことにより、さらなる知見を得ることが可能である。今後は類似検索の尺度の多様化や化合物描画ツールを取り入れた検索システムの採用など、機能を充実させることを検討している。我々のデータベースは <http://pharminfo.pharm.kyoto-u.ac.jp/services/glida/> で利用可能である。