

GS02-6 バイオインフォマティクスを応用した実験データの活用と創薬の効率化

○河合 駿¹, 蟹江 慧¹, 加藤 竜司¹

¹名大院創薬科学

患者の QOL 向上には、新薬創出による Unmet Medical Needs の充足が重要であり、異なる学術領域の融合がますます重要である。現在、生物学的アッセイは、装置や評価系の進化から膨大なデータを生み出しつつあり、人間の経験と知識的側面だけから評価・解釈をすることは極めて難しい。このような現状において、Bioinformatics（生物情報処理）は潜在的な可能性を拾い上げるツールとして有効である。Bioinformatics の手法の多くは生命現象の理解を目的とすることが多いが、研究そのものの効率化や迅速化を進めるにも非常に有効であり、本研究発表では幾つかの例を紹介する。

（細胞形態情報を用いたスクリーニング）従来、細胞アッセイの多くは消耗品や時間を有することが多くスクリーニングの課題である。本研究では細胞品質を反映する細胞の形の定量化を行い、“細胞の形”を位相差画像から抽出するだけで早期かつ迅速に薬剤の効果を評価できる可能性が示唆された。

（腸管吸収医薬品の *in silico* 予測）生体ではジ・トリペプチドやペプチド様医薬品の吸収は、主にヒトの腸管などに発現するペプチドトランスポータが担っている。本研究ではモデルケースとしてジペプチド-酵母トランスポータ Ptr2p 親和性の網羅的な測定結果を基に、ペプチドの配列的解釈だけでなく、基質を物理化学的数値に変換し、多変量解析によって Ptr2p に関わる重要な性質を抽出した。また、この性質から Ptr2p の医薬品吸収性の推定に成功し、医薬品評価の効率性向上の可能性を示した。