

平成 27 年度 全体研究開発報告書

1. 補助事業名：創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業
(創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業)
2. 補助事業課題名：構造生命科学データクラウドの構築運用と高度化
3. 研究開発代表者：大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所
生命情報研究センター 特任教授 由良敬
4. 研究開発の成果：

創薬・医療技術シーズを着実かつ迅速に医薬品等に結びつける革新的プロセスを実現するため、情報拠点が結束し全体としてわが国の創薬プロセス等に活用可能な情報基盤を研究開発などの高度化を通して整備し、積極的に共同研究の支援や外部利用の促進をすることによって、創薬等支援技術基盤の確立を行うことを情報拠点の目的とし、平成 27 年度の研究開発を行った。この目的を達成するために、昨年度に引き続き、国立遺伝学研究所を情報拠点の代表機関とし、大阪大学蛋白質研究所・東北大学・東京大学・お茶の水女子大学の協力の下、構造生物学を他の生命科学に浸透させた「構造生命科学」という新しい分野の形成に貢献する研究事業として以下の 5 点を実施した。

(1) タンパク 3000 (P3K) とターゲットタンパク研究プログラム (TPRP) 情報プラットフォーム由来のデータベースとツールの運用：既存の構造生物学関連の国家プロジェクトの成果からなるデータベースと利用ツールを、平成 26 年度実施した有用性と利便性に基づく査定に基づいて選定し、有益なデータベースとツールを基盤として提供し更新運用した。データベースとツールは、以下の URL に整理し、キーワードなどで検索ができるようにした上で、継続的に提供し、データの更新と運用を実施した (<http://p4d-info.nig.ac.jp>)。その結果、例えばオートファジー DB (継承 DB) では、一月あたり約 998 件の訪問実績を維持し、オートファジーのコミュニティーを支援することができた。また、「解析」と「制御」の両拠点が必要とする情報の蓄積・提供ならびに両拠点の成果普及を行った。それらの成果として、情報を以下の URL から提供し、両拠点の成果普及を行った (<http://pford.jp/>)。

(2) 「構造生命科学データクラウド第 2 版：VaProS (Variation effect on Protein Structure and function)」の公開：構造生物学に関する情報に加えて、ゲノム情報・遺伝子発現情報・遺伝子ネットワーク等の他分野の生命情報を取り込み、多種多様なデータベースが活用形態の差異を意識することなく利用できる「構造生命科学データクラウド VaProS」を運用することができた。さらに、解析拠点機能ゲノミクス領域との協力で、さまざまなゲノムデータを解析できるようにすることを目的に、利用講習会を 3 回 (10 月 14 日 (東京)、3 月 15 日 (大阪)、3 月 29 日 (札幌))、個別利用講演会を 2 回 (名古屋、長浜) 開催し、利用を促進した。その結果一月あたり約 4,740 件の訪問実績を得ている。

(3) 利用動向ならびに共同研究の聞き取り調査と利用大会の開催：単なるデータベースやツールの公開に終わることのないように、それらの利用法について分かりやすい解説を行うことや過去に成功した事例等も紹介し、情報・ツールの利用促進の為に情報発信を継続することができた。具体的には、事例等をチュートリアルやマニュアルとしてオンラインで紹介した。さらに「構造生命科学データクラウド VaProS」の利用大会を遺伝学研究所で 5 月 19 日～22 日に開催し、他拠点の参加者も加わりながら、構造生命科学データクラウドによる成果産出の支援をおこなった。さらに、PDISをはじめと

するさまざまな研究成果を創薬等PF・構造生命科学ニュースウォッチとして公開 (<http://p4d-info.nig.ac.jp/newswatch/index.php>) し、利用動向や共同研究の促進を実施した。この情報発信サイトは、訪問者が多くニュース掲載の翌日までの訪問者が50件近くに達する場合もある。また、PDIS事業の参加者以外からも、ニュース作成に対して感謝の連絡を受けることもある。

(4) 構造生物学と他の生命科学分野の連携の基盤となる「構造生命科学データクラウドVaProS」の高度化：大阪大学蛋白質研究所が分担する「構造生物学（タンパク質）統合データベース」を核に、各分担機関とも協力して、構造生物学に関する既存国家プロジェクトの成果と、ゲノムネットワークプロジェクトやセルイノベーションプロジェクトの成果としてのデータベースなど、他分野の成果も含めて、構造生命科学研究の基盤となる「構造生命科学データクラウドVaProS」を発展させた。この「構造生命科学データクラウドVaProS」を通して、創薬等に重要なタンパク質の機能や構造の予測及び解析指針の導出をはかり、タンパク質に影響を与える化学物質や技術情報の探索を「支援」することはもちろんのこと、下記に記載する研究開発によってさらなる「高度化」をはかることを達成目標とする。平成26年度までに収集した情報資源を組み込み、「情報伝達・セルサイクル・遺伝子発現制御」の場におけるタンパク質の振る舞いの情報を一体のものとして俯瞰可能とするようなデータクラウドを各分担機関と協力して構築した。例えば、ヒトのセルサイクルに関与するタンパク質782個を抽出し、その中に26,211個のタンパク質間相互作用が存在することをVaProSで解析できることを実証した。さらに、解析領域機能ゲノミクスから産出されるゲノムデータもCis-Finderのツールを通して「構造生命科学データクラウドVaProS」に取り入れ、他のデータと有機的に結合できるようにした。これらのデータとツールはVaProSから発信されている。

(5) 拠点運営：外部有識者を半数以上含む情報拠点推進委員会を設置・開催し、報告・審議・評価を行うことで、拠点内部だけでなく外部からの意見も取り入れながら、拠点の運営を進めた。情報拠点推進委員会を8月17日と3月3日に開催し、PO/PSにもオブザーバ参加していただき、情報拠点の運営状況を審議していただいた。また、代表機関と分担機関の実施者で構成する情報拠点全体の会議（情報拠点全体会議）をほぼ毎月開催し、各機関の動向と具体的成果を相互に共有しつつ情報拠点事業に関する議論を深めることにより、拠点全体として、整合的かつ効果的運営を行い、VaProSの高度化とVaProSによる支援を行った。