

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
(構造生命科学データクラウドにおける蛋白質構造データ解析関連技術の開発と支援)
3. 研究開発代表者：大阪大学蛋白質研究所 准教授 金城玲
4. 研究開発の成果

タンパク質の立体構造情報を、各種モデル生物のゲノム情報を縦軸に、分子間相互作用ネットワーク情報を横軸にして生命科学の幅広い領域を融合し、「構造生命科学データクラウド」中に高度化したデータベースを「VaProS」として構築した。膨大な数に上る生命科学関連データベースを無差別に統合するのではなく、比較的少数のデータベースを精選し、一度分解した上で、ゲノム、ネットワークおよび立体構造の観点から1つのデータベースとして再構成することで高度化を図った。こうすることで、ゲノムとネットワークを両軸としてみた生命科学領域(ゲノム-ネットワーク空間)の中で、興味あるタンパク質について、構造既知のホモログがどの種に存在するのか、どのネットワークで他の生体分子や薬物とどのように相互作用しうるのかを俯瞰し、モデリングとシミュレーションを含めた立体構造・機能解析の戦略立案に役立てるための情報基盤を提供している。

支援

- ①データベース関連情報提供：データベースとその関連ツール及び分子シミュレーション等の構造機能解析技術の開発と提供による支援を継続して行った。現在3報の論文の準備を進めている。
- ②講習会等：タンパク質関連データベースに関する技術的な情報を継続して提供する。タンパク質立体構造データベース(PDB)における構造データの扱い方に関する講習会等を計5回行った。

高度化

- ③基幹データベースの公開と更新：ゲノム配列データベースとタンパク質立体構造データベースを用いて、アミノ酸配列からタンパク質複合体、タンパク質-低分子化合物複合体、タンパク質-核酸複合体の推定を行うサーバを公開し、研究者コミュニティに提供した。最新データへの更新を随時行った。累計アクセス数は計2万件程度になった。
- ④サーバパイプライン公開：情報拠点の他機関で開発されつつある各種解析サーバ(モデリング、ゲノムアノテーション等)を繋ぐパイプラインをデータクラウド第2版: VaProS (Variation effect on Protein Structure and function)として公開、運用した。これを活用してヒト蛋白質の約7割および遺伝病関連蛋白質の約9割は部分的にすでに構造が決定されていることなどを明らかにした。