



創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム
Basis for Supporting Innovative Drug Discovery and Life Science Research

BINDS ユニット連携講習会

2019年11月1日(金)

13:30~17:00

主催: BINDS (創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム)
プラットフォーム機能最適化ユニット・インシリコユニット



場所: 早稲田大学西早稲田キャンパス
63号館3階Dルーム

〒169-8555

東京都新宿区大久保3-4-1

*東京メトロ副都心線: 西早稲田駅直結

*JR / 東西線: 高田馬場駅徒歩15分

参加費: 無料

定員: 30名 *先着順

参加には事前登録が必要です。由良研究室
(yuralab-assist@list.waseda.jp)宛に、
「講習会参加希望」のご一報をください。
折り返し、ご案内と参加フォームをお送りします。

プログラム(予定)

- 13:30 - 13:35: AMED からのご案内
- 13:35 - 14:20: 由良 敬 (早稲田大学先進理工学部・教授)
「VaProS の紹介と実習」
- 14:20 - 15:05: 木下 賢吾 (東北大学大学院・教授)
「Natural Ligand DB の紹介と実習」
- 15:20 - 16:05: 川端 猛 (大阪大学蛋白質研究所・特任准教授)
「HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索・モデリング実習」
- 16:05 - 16:50: 富井 健太郎 (産業技術総合研究所人工知能研究センター・研究チーム長)
「タンパク質の基質結合部位類似性検索データベース PoSSuM の紹介と実習」

*講習会で使用するPCは、開催者側で用意します。

【お問い合わせ】

〒169-8555 東京都新宿区大久保3-4-1

早稲田大学理工学部55号館5棟504A 由良研究室

TEL: 03-5286-3441

E-mail: yuralab-assist@list.waseda.jp

講習会概要

ゲノムやタンパク質のコンピュータ解析は、シミュレーションと情報検索に大別することができます。得られる情報の増大により、いずれの分野も活発に研究が進むとともに、大変複雑になってきています。本講習会では、特に情報検索に特化し、どのような情報がデータベース検索によって得られるのかを、実際にデータベースにアクセスしながら講習します。当該分野に興味がある学生から研究者まで、様々な方々の参加を歓迎します。

講習会要旨

■13:35 -: 由良 敬（早稲田大学先進理工学部・教授）

VaProS の紹介と実習：VaProSはBINDSで開発されている、複数のデータベースから知識を発見することをめざしたアプリケーションです。様々なデータベースを同時検索し、その結果をユーザにまとめて見せることで、ユーザは複雑な操作から解放され、考えることに集中できます。本講習会では、具体的な検索を通して、VaProSの使い方を実演します。

■14:20 -: 木下 賢吾（東北大学大学院・教授）

Natural Ligand DB (NLDB) の紹介と実習：NLDBは、KEGGパスウェイにある反応に係わるタンパク質構造と低分子複合体のデータベースです。創薬を念頭にヒトに特化しています。また、個別化創薬に向けて、ゲノム変異をタンパク質構造にマップした結果も提供しています。本講習会では、データベースの内容と使い方の説明をします。また、我々が開発した変異のタンパク質構造へのマッピング手法は、日本人マルチオミックス参照パネル(jMorp)でも利用されているので、関連するデータベースとして、簡単に紹介します。

■15:20 -: 川端 猛（大阪大学蛋白質研究所・特任准教授）

HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索・モデリング実習：タンパク質が他の分子と結合した状態の複合体構造は、その分子機能の理解やアミノ酸変異の影響を考えるために役立ちます。HOMCOSは、PDBデータベースに登録された複合体立体構造を検索し、類似構造を鋳型にしてモデリングを行うためのサーバです。実習では、他のタンパク質や低分子化合物との複合体の検索と簡易なモデリングを行っていただきます。

■16:05 -: 富井 健太郎（産総研・人工知能研究センター・研究チーム長）

タンパク質の基質結合部位類似性検索データベース PoSSuM の紹介と実習：PoSSuM は、タンパク質の立体構造情報に基づき、現在、およそ 650 万にのぼるタンパク質の基質結合(候補)部位の類似性を網羅的に比較した結果をまとめたデータベースです。本講習会では、データベースの内容とその構築方法、そしていくつかの例を用いてデータベースの利用法などを紹介します。