

第208回

N-BIO

バイオセミナー

7.23 火 15:20~16:40

長浜バイオ大学 命北館4F 中講義室⑤

核酸標的 low 分子創成の課題と展望（機械学習による Focused Library Prediction の可能性）

なかに かずひこ
中谷 和彦 先生

所属・職位

大阪大学産業科学研究所・教授

専門分野

ゲノム科学

オーガナイザー

バイオデータサイエンス学科
中村 卓 先生

ヒトゲノムの解読後、ゲノムの大半が転写された RNA として機能していることが明らかとなった。その結果、これまでのタンパクを標的とした創薬に加えて、核酸、特に RNA を標的とした創薬研究が注目を浴びている。しかし、RNA を標的とした創薬研究は歴史が浅く、情報量が決定的に不足している。私の研究室では、核酸を標的として低分子創製を研究してきたが、今後この分野の飛躍的な発展には、情報科学を取り入れた研究技術の開発が不可欠であると考え、機械学習による Focused Library Prediction 技術の開発に取り組んでいる。Focused Library とは、創薬企業が持つ数十万～百万化合物の Library から、創薬標的となるタンパクや RNA に結合する化合物が濃縮された Library を指し、この Focused Library をスクリーニングすることにより、高い確率でヒット化合物を見出すことが期待される。

講演では、核酸標的 low 分子創製について概説したあと、実例を使いながら Random Forest Classification を用いた Focused Library Prediction について紹介する。

ご専門の研究分野を問わず、先生方、大学院生の皆さんを始め、学部学生の皆さんも多数ご参加ください！