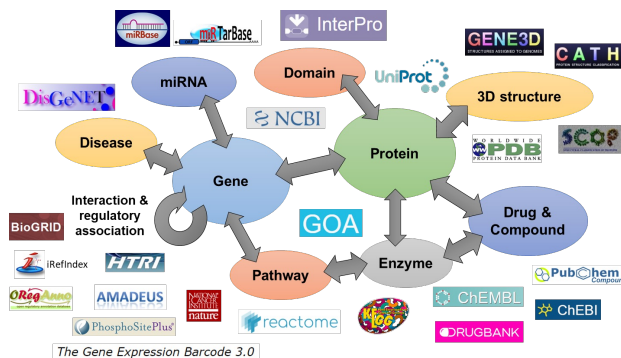




私たちは計算生物学を用いて生体分子の機能や反応及び病気との関係を統合的に理解し、新たな知見に基づいた新薬の創出を目指して研究を行っています。

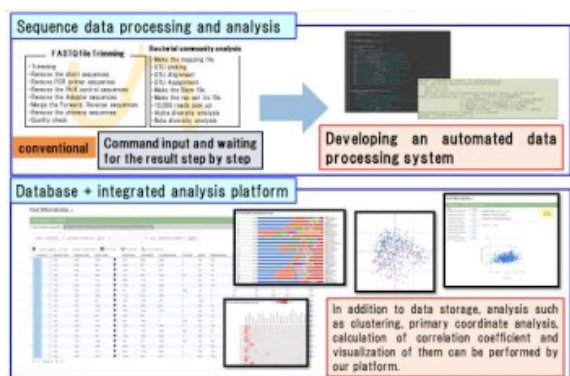
❖ 分子と高次の生命現象を繋げるためのデータ統合

タンパク質や創薬研究に関連する大量のデータが様々な公共データベースにおいて提供されていますが、このような「ビッグデータ」を活用するには多くの課題が存在します。私たちは、分子レベルから高次の生体システムで起こる事象を橋渡しし、統合データベースや関連する方法論を開発することを目的として研究を行っています。



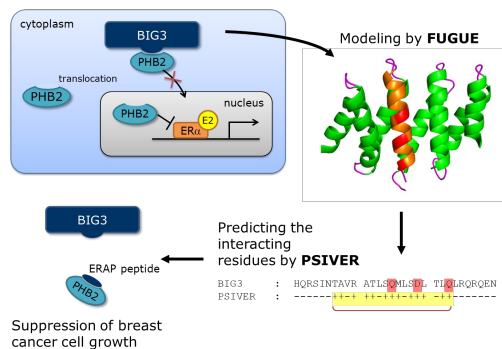
❖ 腸内細菌叢と生活習慣データ等との関連解析および解析プラットフォームの開発

腸内細菌叢の乱れは、多様な疾患の原因となることが報告されており、腸内細菌叢の変化のモニタリングは、疾病の早期発見や予防のみならず健康の指標として活用されることが期待されています。私たちは大量のシーケンズデータを効率的かつより正確に処理するパイプラインを構築するとともに、腸内細菌と生活習慣などのフェノタイプ間の相互関係の解明に取り組んでいます。



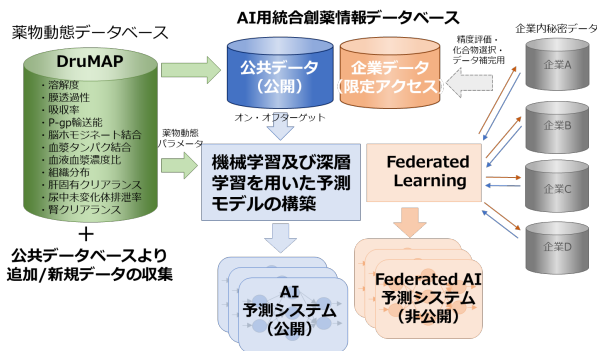
❖ 蛋白質を介する相互作用の理解・予測と生体反応のモデル化

実験的に決定されたタンパク質の構造や相互作用の量が増え、アミノ酸配列情報のみからタンパク質の構造、機能、相互作用を予測することが可能になりました。私たちは、機械学習などを用いた新しい手法を開発する一方で、特定の生物システムの解析にも力を入れ、直接実験によって検証可能な仮説を提示することを目指しています。



❖ 創薬創出を目的とした薬物動態予測

AI技術を活用したインシリコ創薬は、計算科学に基づいた創薬手法です。創薬初期に化合物プロファイルを構造情報から予測することで、薬効不足や予期しない副作用発生の可能性を減少させ、創薬プロセスを効率化することを目指しています。公共データの収集と共に、国内製薬企業との連携を行うことで、より高精度の薬物動態予測システムを構築中です。



連絡先
水口賢司



国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所
E-mail: kenji@nibiohn.go.jp
URL: <https://mizuguchilab.org/>

