

研究成果最適展開支援事業 (A-STEP) FS ステージ (シーズ顕在化) 事後評価報告書

プロジェクトリーダー (企業責任者) : (株) エスアンドシー

研究責任者 : (独) 産業技術総合研究所 福井 一彦

研究開発課題名 : クラウドコンピューティングによるタンパク質間相互作用解析プラットフォームの開発

1. 研究開発の目的

本研究の目的は、解析が複雑であり計算時間を要するタンパク質間相互作用(PPI)に着眼し、データベースと連携したタンパク質同士の膨大な組み合わせについて容易にドッキング計算を可能とする解析プラットフォームの開発を実施することである。このプラットフォーム上では、仮想化技術により連携したデータベースと可視化されたPPI解析ソフトが繋げられ、相互連携により解析情報の価値を上げることを可能とするシステムである。近年、タンパク質間相互作用に基づく医薬品開発は非常に注目されており、この開発した解析システムを使用することで、高速にかつ網羅的にPPIネットワークをコンピュータによりスクリーニングできる可能性がある。

2. 研究開発の概要

①成果

In silico スクリーニングとしてタンパク質間の相互作用を解析するためには、タンパク質同士の膨大な組み合わせについてドッキング計算を実行する必要がある。産総研は計算に含まれるFFT計算を高速化し、メニーコアプロセッサ(CPU)とアクセラレータ(GPU)による計算機を用い、網羅的に高速ドッキング計算できるアルゴリズムとソフトウェア開発を行ってきた。本研究開発では、それらのソフトウェアの利便性と効率性の向上を目指し、ソフトウェアやデータベースを組み合わせ高度なタンパク質間相互作用解析をより効率よく実現できるワークフローの開発を行った。またワークフローから、複数のデータベースを仮想化したデータにアクセスするためのデータ連携技術開発を行い、タンパク質間相互作用解析とデータアクセスを連動させる解析環境(プラットフォーム)の開発を行った。

②今後の展開

今後は、網羅的なタンパク質-タンパク質計算結果の蓄積を行う。また3次元立体構造未知のタンパク質モデリング・ワークフローとの連携を行い相互作用計算の拡張を目指す。さらにはPPI実験データと解析プラットフォームの連携などが考えられる。データ連携技術の面では、検索機能強化や仮想統合定義の半自動化のために、データ連結ロジックの検討・改良を行う。

3. 総合所見

概ね期待通りの成果が得られ、イノベーション創出が期待される。GRID計算機で走るタンパク質間相互作用の解析プラットフォームを開発し、IT非専門のユーザに向けた使いやすさと融通性、処理時間の高速化、経済性を達成した。このプラットフォームでは、一連の解析プロセスが取り扱い易いワークフロー形式を採用し、書式形式が異なる複数のタンパク質データベースを連結できるデータベースの仮想化に向けたミドルウェアの開発が行われた。解析プラットフォームのツールの充実や実証研究を進め、タンパク質機能の解明研究分野で活用される解析システムに仕上げたい。