

## 研究テーマ 分子シミュレーション解析による医学研究

所属 学術研究部医学系

教授 高岡 裕

<https://researchmap.jp/medacp2203>



研究分野	バイオインフォマティクス
キーワード	計算創薬、薬効予測、副作用予測、病態解明

研究室URL <https://ebraille.med.u-toyama.ac.jp/hp/>



### 研究の背景および目的

これまでに、抗がん剤の副作用に直結する薬物動態のコンピュータ予測、分子シミュレーションと数理モデル系を確立し特許取得し、その解析系で別の薬の副作用予測に成功、肺癌患者で新規に発見されたEGFR変異型delE746の立体構造と治療薬との結合能をin silico解析して結合安定性と薬効の相関を発見、新型コロナウイルスの感染力予測の実現、などのように副作用・薬効予測、創薬や病態解析について、スーパーコンピュータも駆使して研究を進めている。



### ■ 主な研究内容

## 研究テーマ（例）

- ・ 抗体医薬の改変評価法の確立
- ・ 新型コロナウイルス変異株の感染力予測
- ・ 分子シミュレーションと数理モデルによるUGT1A1抱合能予測と副作用の病態解明
- ・ 分子シミュレーションによるEGFR-TKIの世代別薬効予測法の確立
- ・ コラーゲンの分子シミュレーションによるアルポート症候群の重症度予測法の確立
- ・ 分子シミュレーションによる家族性アミロイドーシスの病態と治療薬の開発
- ・ タンパク質機能を構造から制御する低分子化合物の探索

以上の研究テーマについて、基礎的なバイオインフォマティクス手法に加えて分子シミュレーションや数理モデルを駆使し、体系的な論理的根拠を基盤として技術開発をすすめ、迅速かつ革新的な計算創薬手法の実現を目指します。また、必要に応じてこれまでも利用してきたスーパーコンピュータ利用も検討し、解析の高速化にも取り組みます。

### 期待される効果・応用分野

計算創薬（Drug Repurposing、核酸医薬設計）、  
薬効予測（核酸医薬）、  
副作用予測（分子標的薬、代謝酵素異常の影響）、  
病態解明（アミノ酸置換が病因の疾患）

### ■ 共同研究・特許など

1. 酵素活性をコンピュータを用いたシミュレーションにより予測する方法 特許第5447383号
2. 核酸医薬候補：XPA pre-mRNAのプロセッシングにおけるエクソン3のスキッピングを誘導するアンチセンスオリゴヌクレオチド 特許第7033300号

富山大学研究者プロフィールPure URL : <https://u-toyama.elsevierpure.com/ja/persons/>



# 研究テーマ 未病研究に関するデータ解析とデータ可視化

所属 未病研究センター

特命准教授 奥 牧人

[https://researchmap.jp/oku\\_makito](https://researchmap.jp/oku_makito)



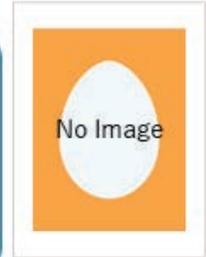
研究分野	生命情報科学、数理科学
キーワード	同期性揺らぎ遺伝子、エネルギー地形解析、クラリネットプロット、分枝埋め込み法

研究室URL <https://okumakito.github.io/jp/#index.md>

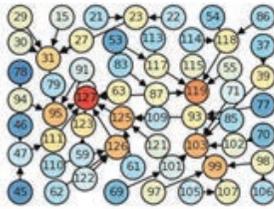


## 研究の背景および目的

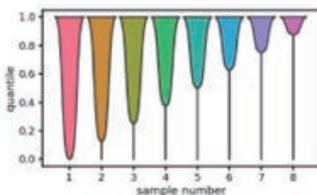
私は未病研究センターで主にRNA-seq、家庭血圧、健康診断のデータ解析を担当している。車輪の再発明を避けるため、既存の手法が有効な場合はそれらを用いる。例えば、発現変動遺伝子解析、主成分分析、階層的クラスタリング、エンリッチメント解析、ロジスティック回帰、エネルギー地形解析、バイオリンプロットなどである。一方、必要に応じて解析法や可視化法も作る。同期性揺らぎ遺伝子解析、分枝埋め込み法、パブロイドアルゴリズム、頂点一様配置法、クラリネットプロットなどである。



## ■ 主な研究内容



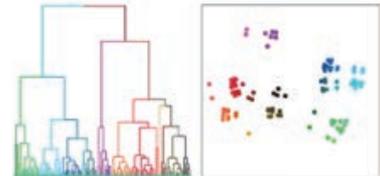
エネルギー地形解析



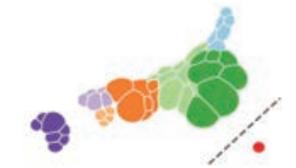
クラリネットプロット



頂点一様配置法



分枝埋め込み法



パブロイドアルゴリズム

## 期待される効果・応用分野

これらの既存または新規のデータ解析法やデータ可視化法はいずれも単なる道具に過ぎないので、手法毎の向き不向き、データの品質や量、結果を解釈する者のドメイン知識量や洞察力次第で有用にも無用にもなり得る。条件が合えば未病研究に限らず様々な研究分野のデータから価値ある知見を引き出すのに役立つ可能性がある。

## ■ 共同研究・特許など

未病に関する非公開データの解析は全て未病研究センターまたはムーンショット研究のメンバーとの共同研究である。特許出願数は分割出願を分けて数えると4件である。開発したデータ解析法やデータ可視化法はオープンサイエンスの観点から原則として一般公開している。

富山大学研究者プロフィールPure URL : <https://u-toyama.elsevierpure.com/ja/persons/>



## 研究テーマ 全天球カメラによる情報収集についての一考察

所属 芸術文化学系

教授 辻合 秀一

<https://researchmap.jp/read0034154>



研究分野	計測・分析
キーワード	全天球画像, プロジェクションマッピング

研究室URL <http://www.tsujiai.com/>



富山大学研究者プロフィールPure URL : <https://u-toyama.elsevierpure.com/ja/persons/>

