

第8回生命医薬情報学連合大会において、白石慧研究員がポスター賞を受賞しました。
(2019年9月11日受賞)

2019年9月9-11日東京工業大学で開催された第8回生命医薬情報学連合大会において、白石慧研究員（統合生体分子機能研究部）を受賞しました。本会は、生物の進化などの基礎研究から、医療などの応用まで、幅広いバイオインフォマティクスに関する研究者および技術者の連携と交流を深める目的で毎年開催されています。本年度の年会で発表された89題のポスターの中から、5件のポスター賞が選ばれました。



受賞対象となったポスターは「機械学習を用いたGPCR-ペプチド間相互作用予測器からの相互作用機序の抽出」(白石慧, 佐竹炎)です。

本研究では、これまでに神経ペプチドとその受容体であるGタンパク共役型受容体 (GPCR) の相互作用をアミノ酸配列に基づいた特徴量に変換し、機械学習 (線形サポートベクトルマシン・線形SVM) を用いて学習・予測するモデルを構築し、30%以上のヒット率で新規相互作用を同定していました。本発表では、線形SVMが学習した重みを元に相互作用に起因する特徴量を抽出することで、GPCRとペプチドの相互作用機序を残基レベルで説明する手法を開発しました。開発した手法を用いることで、共に神経ペプチドの一種であるSubstance Pを受容するが、配列相同性のないNK1RとMRGPRX2の二種類のGPCRでSubstance P受容能に寄与している残基が保存されていることが明らかとなりました(下図・黄色の残基)。実際に機械学習を用いて新規相互作用を同定している点・線形SVMの特徴量抽出が可能であるという特徴を活かして相互作用機序を説明可能な点が評価され、昨年度の第7回生命医薬情報学連合大会に引き続き二年連続の受賞となりました。また、本研究の一部は、*Proc Natl Acad Sci U S A.* **2019**, 116, 7847-7856.に発表されています。

