

令和 3 年 6 月 22 日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2020

課題番号：18K18149

研究課題名(和文)ミトコンドリアを取り巻く未知のインタラクトームの予測と実証

研究課題名(英文)Computational prediction of mitochondrial protein interactome

研究代表者

大上 雅史(Ohue, Masahito)

東京工業大学・情報理工学院・助教

研究者番号：50743209

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：ミトコンドリアタンパク質の網羅的な理解は医薬・生物学の大きな課題となっている。特にミトコンドリアタンパク質が関与するタンパク質間相互作用(PPI)については、創薬標的としての価値が高いもののほとんど調べられておらず、また情報も散在している状況であった。本研究課題はミトコンドリアタンパク質の網羅的なPPI=インタラクトームを解明するための技術を開発することを目的とし、PPI予測技術MEGADOCKの高度化ならびに網羅的PPI予測を実施した結果を整理したデータベースを開発し、さらに関連情報を統合して公開した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ミトコンドリアに存在するタンパク質はミトコンドリア病をはじめとする様々な疾病と関係しているため、治療手段の無い疾病のための薬の開発などにミトコンドリアタンパク質の理解を進めることが重要である。本研究では、タンパク質同士の相互作用という機能に着目し、そのような相互作用が行われているかを計算によって網羅的に予測することを行った。開発したデータベースであるMEGADOCK-Web-Mitoは自由にアクセスすることができ、創薬研究開発などの加速に貢献することが期待される。

研究成果の概要(英文)：A comprehensive understanding of mitochondrial proteins has been a major challenge in biology and medicine. In particular, protein-protein interactions (PPIs) involving mitochondrial proteins have been little investigated and information on them is scattered, although they are highly valuable as drug targets. The aim of this project was to develop a technology to elucidate the comprehensive interactome of mitochondrial proteins. We have developed an advanced PPI prediction technology, MEGADOCK. In addition, we developed a database of the results of the comprehensive PPI prediction, integrated the related information, and published it.

研究分野：バイオインフォマティクス

キーワード：バイオインフォマティクス タンパク質間相互作用 インタラクトーム ミトコンドリアタンパク質

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

ミトコンドリアは、独自のゲノム (mtDNA) を持つ細胞小器官であり、エネルギー産生などの生命現象と深い関わりがある。mtDNA の変異は指定難病である「ミトコンドリア病」の要因であり、ミトコンドリアがおよぼす生命現象の理解は、生命科学のみならず医学薬学分野にもきわめて重要な課題である。しかし、ミトコンドリア内に存在するタンパク質 (ミトコンドリアタンパク質) は約 3,600 種類あり (Calvo SE, et al. NAR, 2016)、そのうち mtDNA がコードするタンパク質はわずか 13 種類である。ミトコンドリアの機能や疾病メカニズムの理解には、mtDNA だけでなく通常の核 DNA にコードされるミトコンドリアタンパク質の機能を理解することが不可欠である。

ミトコンドリアタンパク質は古くからその機能の重要性が認識されており、MitoProteome データベース (Cotter D, et al. NAR, 2004) や HmtDB (Rubino F, et al. NAR, 2012) などの統合データベースにより、注釈付けや関連情報の紐付けが進んでいる。一方で、タンパク質を理解する上で無くてはならないタンパク質間相互作用 (Protein-Protein Interaction, PPI) の情報は未だ統合化が進んでいない。HINT (Das J & Yu H. BMC Syst Biol, 2012) や H-Inv DB (Takeda J, et al. NAR, 2013) といった PPI 自体の統合データベースは存在するものの、ミトコンドリアタンパク質との紐付けは行われていない上、未だ見つかっていない未知の PPI も数多く存在する状況である。これらは研究対象や創薬標的としてこれまで見過ごされていた可能性がある。

2. 研究の目的

本研究ではミトコンドリアを取り巻く網羅的な PPI=ミトコンドリアインタラクトームに着目し、ミトコンドリアインタラクトームの全容を解明するための手がかりとなる計算予測と、その結果の整理を目的とした。

3. 研究の方法

MitoProteome からミトコンドリアタンパク質の情報を抽出し、対象のタンパク質リストを構築する。リストとタンパク質構造データベース PDB を照合し、立体構造情報を収集する。ミトコンドリアタンパク質以外の細胞質内タンパク質については UniProt データベースの細胞内局在情報を用いて収集し、同様に PDB から立体構造情報を収集する。また疾病、薬剤、パスウェイ情報などは KEGG から収集する。PPI 予測については、MEGADOCK を本研究で最適化して用いた。

4. 研究成果

MitoProteome からミトコンドリアに関連するタンパク質の UniProt AC を取得し、対応するタンパク質 Chain 構造を PDB より収集した結果、1,675 構造のタンパク質 Chain を得た。これらの Chain 構造に対して MEGADOCK 4.1.2 による全体全 PPI 予測計算を実施した。計 2,805,625 組の PPI 予測計算は、東工大 TSUBAME 3.0 スーパーコンピューターを用いて約 320 node・day の時間で完了した。

これらの計算結果に対し、MitoProteome のレコード識別子である Mito ID と、Entrez Gene の GeneID、各タンパク質の属する KEGG パスウェイへの対応付けを行い、MEGADOCK-Web (Hayashi, et al. BMC Bioinform, 2018) を改良した MEGADOCK-Web-Mito データベースおよびウェブインターフェースとして新たに構築した (図 1)。

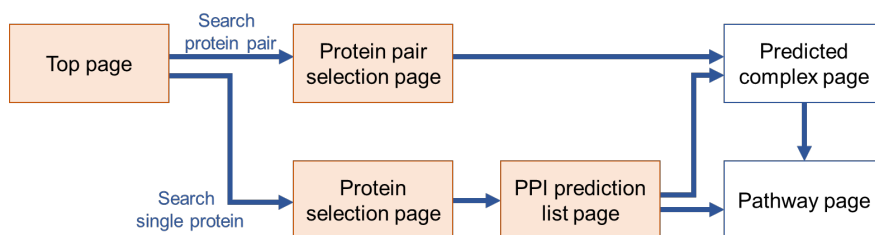


図 1 MEGADOCK-Web-Mito データベースのウェブページ構造。橙色の箇所は MEGADOCK-Web (Hayashi et al. 2018) と比較した MEGADOCK-Web-Mito 独自の機能が実装された箇所。

例として、MEGADOCK-Web-Mitoを使って、パーキンソン病に関連する MitoProteome の Mito ID 「MT000972」のタンパク質の PPI 予測情報を取得する使用例を示す。

1. MEGADOCK-Web-Mito で Mito ID MT000972 のタンパク質を検索すると、図 2(a) のような結果が得られる。Gene symbol は「HTRA2」であり、Chain 構造は 2 種類 (2PZD_A と 5FHT_A) 存在する。
2. 予測結果の KEGG パスウェイ情報 (図 2(b)) から「hsa05012 Parkinson disease」を参照すると、HTRA2 の近傍に DJ-1 というタンパク質が存在することがわかる (図 2(c))。
3. MEGADOCK-Web-Mito で DJ-1 というタンパク質を検索すると、Mito ID MT000850 の PARK7 という関連する Gene が存在することがわかる。PARK7 は 4 つの Chain 構造 (1PDW_A, 1PEO_A, 2RK3_A, 3BWE_A) が存在する。
4. HTRA2 と DJ-1 の PPI 予測結果の 1 つを図 3 に示す。図 3 では 5FHT_A と 3BWE_A の複合体予測構造を示しており、予測される相互作用の信頼度 (PPI Score) も比較的高い値 (8.47) となっていることがわかる。

本研究課題で構築した MEGADOCK-Web-Mito は、<http://www.bi.cs.titech.ac.jp/megadock-web-mito/> からアクセス可能である。また、今後予測された PPI に対して (重要度の高いものから) 生化学実験による検証を進めていく予定である。本研究成果の一部は arXiv (<https://arxiv.org/abs/2105.00445>) で公開したほか、国際会議 The 27th International Conference on Parallel & Distributed Processing (PDPTA' 21) で発表予定である。

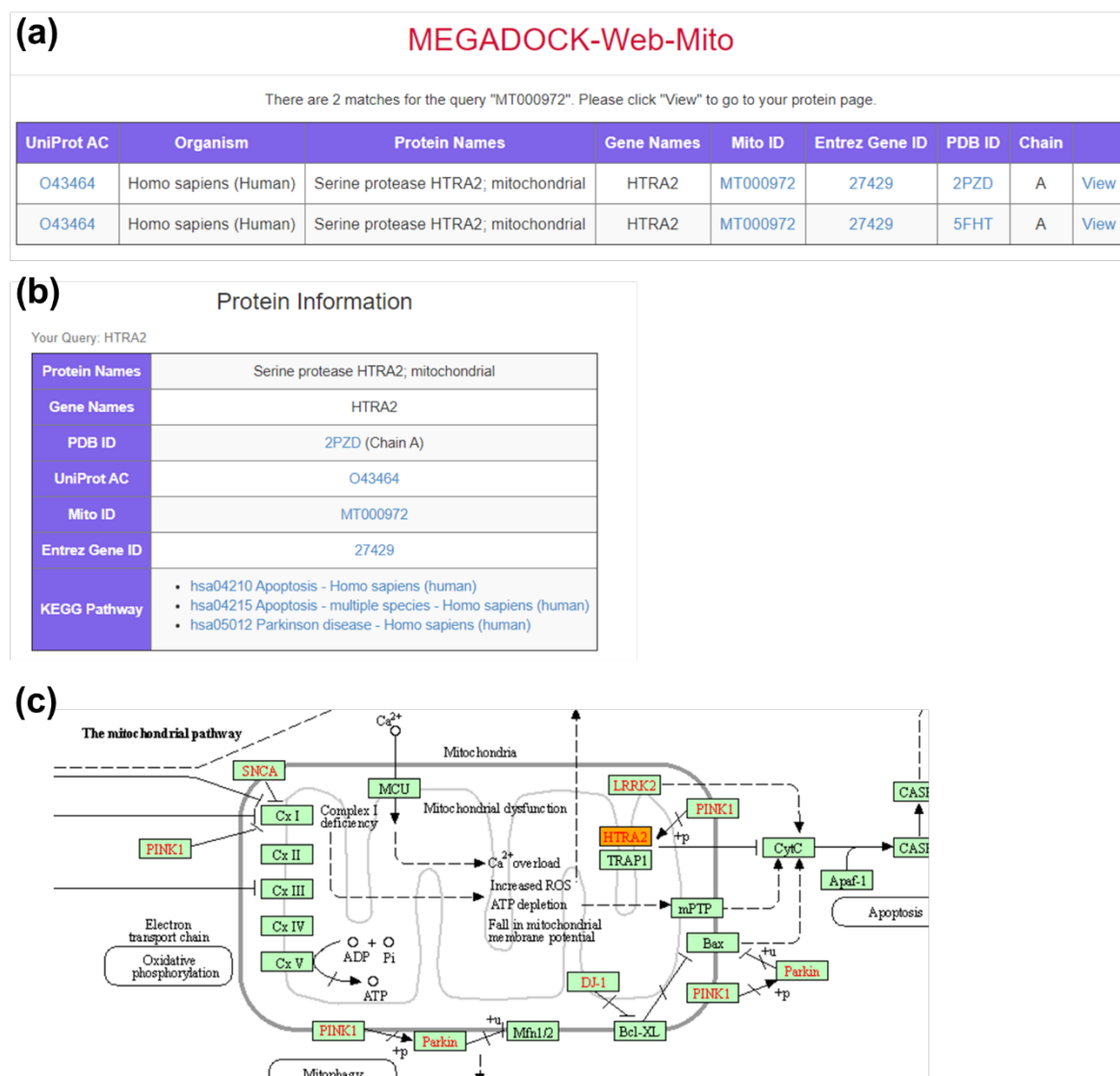


図 2 (a) Protein selection page の例。"MT000972"で検索した結果を示している。(b) Mito ID MT000972 の詳細。(c) Parkinson's disease pathway の KEGG pathway 図。MT000972 のタンパク質である HTRA2 (橙色網掛) およびその PPI 予測結果 (予測された相互作用相手、橙色文字) が示されている。

Docking Information

PPIScore: 8.473203 [Show KEGG Pathway](#)

	Protein Names	Gene Names	PDB ID
Protein1	Serine protease HTRA2; mitochondrial	HTRA2	5FHT (Chain A)
Protein2	Protein/nucleic acid deglycase DJ-1	PARK7	3BWE (Chain A)

Docking results from rank 1 to 10
[Download complex in this page](#)
[Download docking result file](#)

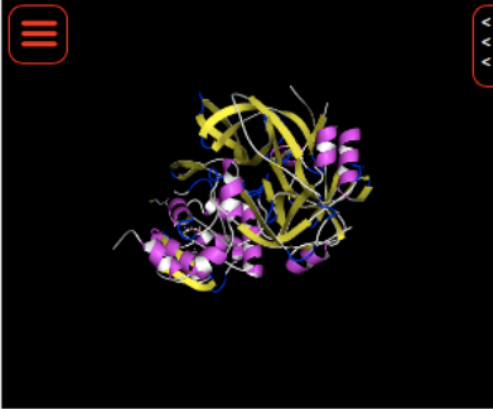

Rank	Score	Model	Download
1	4908.32		5FHT_A-3BWE_A.decoy1.pdb
2	4672.64		5FHT_A-3BWE_A.decoy2.pdb

図3 5FHT_A (HTRA2) と 3BWE_A (PARK7) の相互作用予測結果と推定される複合体構造モデル

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 14件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 13件）

1. 著者名 Masahito Ohue, Hiroki Watanabe, Yutaka Akiyama	4. 巻 -
2. 論文標題 MEGADOCK-Web-Mito: human mitochondrial protein-protein interaction prediction database	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The 27th International Conference on Parallel & Distributed Processing (PDPTA '21), Advances in Parallel & Distributed Processing and Applications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Masahito Ohue, Yutaka Akiyama	4. 巻 -
2. 論文標題 MEGADOCK-GUI: a GUI-based complete cross-docking tool for exploring protein-protein interactions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The 27th International Conference on Parallel & Distributed Processing (PDPTA '21), Advances in Parallel & Distributed Processing and Applications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Masahito Ohue, Kento Aoyama, Yutaka Akiyama	4. 巻 -
2. 論文標題 High-performance cloud computing for exhaustive protein-protein docking	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The 26th International Conference on Parallel & Distributed Processing (PDPTA '20), Advances in Parallel & Distributed Processing and Applications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Launay Guillaume, Ohue Masahito, Prieto Santero Julia, Matsuzaki Yuri, Hilpert Cécile, Uchikoga Nobuyuki, Hayashi Takanori, Martin Juliette	4. 巻 7
2. 論文標題 Evaluation of CONSRANK-Like Scoring Functions for Rescoring Ensembles of Protein-Protein Docking Poses	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Frontiers in Molecular Biosciences	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fmolb.2020.559005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Launay Guillaume, Ohue Masahito, Santero Julia Prieto, Matsuzaki Yuri, Hilpert C?cile, Uchikoga Nobuyuki, Hayashi Takanori, Martin Juliette	4. 巻 2020.04.24.059469
2. 論文標題 Rescoring ensembles of protein-protein docking poses using consensus approaches	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 bioRxiv	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1101/2020.04.24.059469	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Matsuno Shumpei, Ohue Masahito, Akiyama Yutaka	4. 巻 17
2. 論文標題 Multidomain protein structure prediction using information about residues interacting on multimeric protein interfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Biophysics and Physicobiology	6. 最初と最後の頁 2 ~ 13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2142/biophysico.BSJ-2019050	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ohue Masahito, Suzuki Shogo D., Akiyama Yutaka	4. 巻 92
2. 論文標題 Learning-to-rank technique based on ignoring meaningless ranking orders between compounds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Graphics and Modelling	6. 最初と最後の頁 192 ~ 200
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jm gm.2019.07.009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Aoyama Kento, Watanabe Hiroki, Ohue Masahito, Akiyama Yutaka	4. 巻 12082
2. 論文標題 Multiple HPC Environments-Aware Container Image Configuration Workflow for Large-Scale All-to-All Protein-Protein Docking Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 In Proceedings of the 6th Asian Conference on Supercomputing Frontiers (SCFA2020), Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 23 ~ 39
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-48842-0_2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Jiang Keren, Zhang Di, Iino Tsubasa, Kimura Risa, Nakajima Tatsuo, Shimizu Kana, Ohue Masahito, Akiyama Yutaka	4. 巻 -
2. 論文標題 A playful tool for predicting protein-protein docking	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 In Proceedings of the 18th International Conference on Mobile and Ubiquitous Multimedia (MUM 2019)	6. 最初と最後の頁 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3365610.3368409	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kento Aoyama, Yuki Yamamoto, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama	4. 巻 -
2. 論文標題 Performance evaluation of MEGADOCK protein-protein interaction prediction system implemented with distributed containers on a cloud computing environment	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 In Proceedings of the 2019 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques & Applications (PDPTA'19)	6. 最初と最後の頁 175 ~ 181
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masahito Ohue, Ryota Ii, Keisuke Yanagisawa, Yutaka Akiyama	4. 巻 -
2. 論文標題 Molecular activity prediction using graph convolutional deep neural network considering distance on a molecular graph	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 In Proceedings of the 2019 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques & Applications (PDPTA'19)	6. 最初と最後の頁 122 ~ 128
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ohue Masahito, Yamasawa Marina, Izawa Kazuki, Akiyama Yutaka	4. 巻 -
2. 論文標題 Parallelized Pipeline for Whole Genome Shotgun Metagenomics with GHOSTZ-GPU and MEGAN	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 In Proceedings of the 19th annual IEEE International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (IEEE BIBE 2019)	6. 最初と最後の頁 152 ~ 156
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ban Tomohiro, Ohue Masahito, Akiyama Yutaka	4. 巻 18
2. 論文標題 NRLMF : Beta-distribution-rescored neighborhood regularized logistic matrix factorization for improving the performance of drug?target interaction prediction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Biochemistry and Biophysics Reports	6. 最初と最後の頁 100615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbrep.2019.01.008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tajimi Takashi, Wakui Naoki, Yanagisawa Keisuke, Yoshikawa Yasushi, Ohue Masahito, Akiyama Yutaka	4. 巻 19
2. 論文標題 Computational prediction of plasma protein binding of cyclic peptides from small molecule experimental data using sparse modeling techniques	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 BMC Bioinformatics	6. 最初と最後の頁 527
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1186/s12859-018-2529-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kami Daisuke, Kitani Tomoya, Nakamura Akihiro, Wakui Naoki, Mizutani Rena, Ohue Masahito, Kametani Fuyuki, Akimitsu Nobuyoshi, Gojo Satoshi	4. 巻 13
2. 論文標題 The DEAD-box RNA-binding protein DDX6 regulates parental RNA decay for cellular reprogramming to pluripotency	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 PLOS ONE	6. 最初と最後の頁 e0203708
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1371/journal.pone.0203708	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hayashi Takanori, Matsuzaki Yuri, Yanagisawa Keisuke, Ohue Masahito, Akiyama Yutaka	4. 巻 19
2. 論文標題 MEGADOCK-Web: an integrated database of high-throughput structure-based protein-protein interaction predictions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 BMC Bioinformatics	6. 最初と最後の頁 62
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1186/s12859-018-2073-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計29件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件）

1. 発表者名 Masahito Ohue
2. 発表標題 Supercomputing-based exhaustive protein-protein interaction prediction with MEGADOCK
3. 学会等名 The 5th IITM-Tokyo Tech Joint Symposium-Current trends in bioinformatics: Big data analysis, machine learning and drug design (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masahito Ohue
2. 発表標題 Learning-to-rank for ligand-based virtual screening
3. 学会等名 AHeDD2019/IPAB2019 Joint Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahito Ohue, Shogo D. Suzuki, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 PKRank & SPDRank - Learning-to-rank methods for machine-learning-based drug discovery
3. 学会等名 Biophysical Society 64th Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroki Watanabe, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Exhaustive protein-protein interaction prediction using MEGADOCK on a large-scale HPC environment
3. 学会等名 2nd RWBC-OIL Workshop
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kento Aoyama, Hiroki Watanabe, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Multiple HPC Environments-Aware Container Image Configuration Workflow for Large-Scale All-to-All Protein-Protein Docking Calculations
3. 学会等名 2nd RWBC-OIL Workshop
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Max Druyvesteyn, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Improved protein-protein docking using arbitrary docking-derived protein interface predictions
3. 学会等名 2nd RWBC-OIL Workshop
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shunpei Matsuno, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Multidomain protein structure prediction using information about residues interacting on multimeric protein interfaces
3. 学会等名 2nd RWBC-OIL Workshop
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kento Aoyama, Hiroki Watanabe, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Multiple HPC Environments-Aware Container Image Configuration for Bioinformatics Application
3. 学会等名 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC'19)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺紘生, 大上雅史, 秋山泰
2. 発表標題 マルチノード・マルチGPU上での網羅的なタンパク質間相互作用予測の高速化
3. 学会等名 情報処理学会研究報告 バイオ情報学研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kentou Aoyama, Yuki Yamamoto, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Performance evaluation of MEGADOCK protein-protein interaction prediction system implemented with distributed containers on a cloud computing environment
3. 学会等名 IPSI Technical Report SIGMPS
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松野駿平, 大上雅史, 秋山泰
2. 発表標題 マルチドメインタンパク質の相互作用残基ペア予測を用いた立体構造予測手法の改良
3. 学会等名 情報処理学会研究報告 バイオ情報学研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大上雅史
2. 発表標題 薬のタネ探しを支援する計算技術
3. 学会等名 LiHub創薬技術革新グループ ワークショップ 異分野融合による創薬研究
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大上雅史
2. 発表標題 薬のタネを探すインフォマティクス技術
3. 学会等名 第42回日本分子生物学会年会, [1F-06]フォーラム 薬効評価・予測技術の進歩による創薬研究の加速
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大上雅史, 鈴木翔吾, 秋山泰
2. 発表標題 PKRank & SPDRank 化合物選別のためのランク学習法
3. 学会等名 生命情報科学若手の会第11回研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahito Ohue, Hiroki Watanabe, Kento Aoyama, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Acceleration and virtualization of parallel protein-protein interaction prediction system MEGADOCK
3. 学会等名 The 57th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahito Ohue, Shogo D. Suzuki, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 PKRank & SPDRank: Learning-to-rank methods for ligand-based virtual screening
3. 学会等名 第8回生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kento Aoyama, Hiroki Watanabe, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Multiple HPC Environments-Aware Container Image Configuration for Bioinformatics Application
3. 学会等名 第8回生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Watanabe, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Accelerating MEGADOCK: protein-protein interaction prediction software on multiple nodes and multiple GPUs environment
3. 学会等名 第8回生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shumpei Matsuno, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 Multidomain protein structure prediction using multimeric interaction residue pair information
3. 学会等名 第8回生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大上雅史
2. 発表標題 バイオデータと戦う情報学
3. 学会等名 情報学の次世代検討会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahito Ohue
2. 発表標題 High Performance Computing Drug Discovery - Toward Targeting Protein-Protein Interactions
3. 学会等名 Advances in Neuroinformatics 2018 (AINI2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masahito Ohue
2. 発表標題 Prediction of Protein-Protein Interactions with MEGADOCK: Parallelization, Application, and Open Database
3. 学会等名 Asia Hub e-Drug Discovery Symposium (AHeDD2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masahito Ohue
2. 発表標題 Supercomputing-based exhaustive protein-protein interaction prediction and its open database
3. 学会等名 The 56th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masahito Ohue
2. 発表標題 MEGADOCK: a supercomputing bioinformatics application for protein-protein interaction prediction
3. 学会等名 1st RWBC-OIL Workshop
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masahito Ohue, Takanori Hayashi, Yuri Matsuzaki, Keisuke Yanagisawa, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 MEGADOCK-Web: An Integrated Database of High-Throughput Structure-Based Protein-Protein Interaction Predictions
3. 学会等名 Biophysical Society 63rd Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Watanabe, Takanori Hayashi, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama
2. 発表標題 MEGADOCK-Web-Mito: a database of computer-predicted mitochondrial protein-protein interactions
3. 学会等名 1st RWBC-OIL Workshop
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡辺紘生, 林孝紀, 大上雅史, 秋山泰
2. 発表標題 ミトコンドリアに関連したヒトタンパク質間相互作用予測データベースMEGADOCK-Web-Mitoの開発
3. 学会等名 情報処理学会研究報告 バイオ情報学
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大上雅史
2. 発表標題 新しい創薬標的の探索を支えるインフォマティクス技術
3. 学会等名 第41回日本分子生物学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林孝紀, 大上雅史, Juliette Martin, Guillaume Launay, 松崎由理, 内古閑伸之, 秋山泰
2. 発表標題 タンパク質複合体構造モデリングの評価のためのベンチマークデータセット
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

http://www.bi.cs.titech.ac.jp/~ohue

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
フランス	CNRS	Lyon 1 University	