



分子生命データベース からの知識発見



Kwansei Gakuin University

関西学院大学 理工学部情報科学科 教授 岡田 孝

キーワード

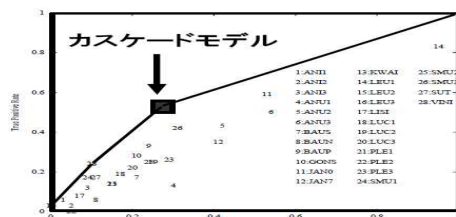
データマイニング 分子生命情報学

研究の概要

現代は情報洪水の時代である。データの中にはたくさんの癖がひそんでいる。この癖を掘り出し、人間に理解できる知識として提供するデータマイニング技術に関して、本研究室は世界最高レベルのソフトウェアを独自に開発している。特に、分子および医薬品に関わる生命の世界では、この技術を適用した実績を豊富に有している。

ネズミの化学発ガン性予測 Predictive Toxicology Challengeで第1位

True positive rate



ROC analysis
for female rats

- ◆ NTPによる化合物417種の発ガン性データからFDAによる185化合物の発ガン性を予測
- ◆ カスケードモデルによる研究結果が下記の双方で世界中からの14チーム中第1位
 - > 理解容易性
 - > 予測精度

研究の応用分野

医薬品の活性や毒性、代謝、および副作用などに関して、すでに薬品会社等と共同研究を遂行している。また、機能性分子の構造がその物性に与える影響についても、共同研究を行っている。データが多数あれば、マイニングの対象はマーケティングからスポーツまで幅広く対象となる。特に理論的理解が困難で、人間では要因を特定できない場合に有効である。

関連業績 (特許・文献)

・ Takashi Okada: Characteristic Substructures and Properties in Chemical Carcinogens Studied by the Cascade Model. *Bioinformatics* 19(10):1208-1215 (2003)

研究室ホームページ

<http://www.dm-lab.ws/>

関西学院大学 研究推進社会連携機構

<http://www.kwansei.ac.jp/kenkyu/>

Tel. 079-565-9052 / Fax. 079-565-7910 E-mail: ip.renkei@kwansei.ac.jp