

課題番号: **LS059**
助成額: 179 百万円

ライフ・イノベーション

生物・医学系

平成 23 年 2 月 10 日
～平成 26 年 3 月 31 日

新薬創出を加速化するインシリコ創薬基盤の確立

奥野 恭史 京都大学大学院薬学研究科 教授
Yasushi Okuno



専門分野

コンピュータ創薬

キーワード

ゲノム創薬／情報科学／バイオインフォマティクス／医薬分子設計／
コンビナトリアル化学／インシリコ創薬／ケモインフォマティクス

WEB ページ

<http://clinfo.med.kyoto-u.ac.jp/>

研究背景

近年、医療費の削減、希少疾患に対する治療薬の観点から、低コスト・短時間で効果的な医薬品を開発することが重要な課題となっている。しかしながら、医薬品候補化合物の化学構造には無限のバラエティーがあることから、効果的な医薬品を効率的に開発するための方法論の確立が強く求められている。

研究目的

本研究では、コンピューターを用いて、病気の原因タンパク質に作用する新しい医薬品候補化合物の分子デザインを自動に行う計算プログラムの開発を目指す。具体的には、最新のIT技術を用いることで、これまで不可能であった無限の化合物候補の中から医薬品候補化合物を高精度かつ効率的に自動デザインする技術を開発する。

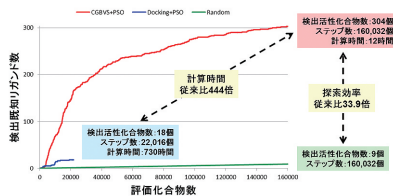
実績

代表論文: Chemistry & Biology, 19(1), 23-8, (2012)
特許出願: 2012-186072 「化合物設計装置、化合物設計方法、及びコンピュータプログラム」 PCT 出願 (2013 年 8 月)
受賞: 第 43 回市村学術賞・貢献賞、新技術開発財団 (2011 年 4 月)
新聞: 読売新聞朝刊 「『京』で創薬欧米と勝負」 (2013 年 9 月 26 日)、日経産業新聞朝刊 「産学でスパコン創薬」 (2012 年 10 月 25 日)
TV: テレビ朝日・報道ステーション 「理化学研究所・スーパーコンピューター『京』本格始動」 (2012 年 9 月 28 日)

研究成果

医薬品候補化合物の自動デザインシステムの開発

標的のタンパク質名を指定するだけで、医薬品候補化合物を自動でデザインするシステム開発を完了した。性能評価を行ったところ、従来技術に比べ、活性化化合物の生成効率が 33.9 倍に劇的に向上し、計算速度においては 444 倍の高速化に成功している。



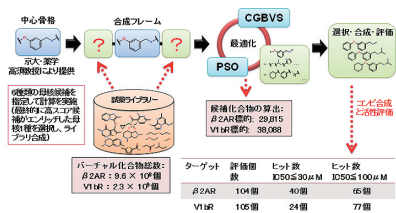
本システムと従来技術について、活性化化合物の生成効率と計算速度を比較したグラフ。赤線が本手法、青線が従来計算法、緑線が計算を用いない場合の計算結果を表している。

2030 年の 応用展開

本システムを始めとしたコンピュータ創薬基盤の開発やスーパーコンピュータへの実装を進めることにより、新薬創出の加速化、医薬品開発効率の劇的向上、創薬力の底上げにつ

ドラッグデザインシステムの医薬品開発への応用

開発したドラッグデザインシステムを用いて、創薬の代表的な標的タンパク質であるキナーゼファミリーと GPCR ファミリーをターゲットとした医薬品候補化合物の自動デザインを試みた。予測した化合物の活性評価を行ったところ、従来比 12.5 倍以上の驚異的な正答率であることが示された。また、ここでデザインされた新規化合物は現在特許申請中である。



ドラッグデザインシステムの医薬品開発への応用例 (実施例) を示した模式図。

ながら、新薬を求める患者への医療貢献と製薬産業界への経済貢献、医療費の削減に資するものと期待される。