

スパコン「京」が拓く医薬品開発の未来 ～速い安い旨い薬づくり～



奥野 恭史（おくの やすし）

京都大学 薬学研究科
教授

【研究分野】

創薬計算科学、創薬インフォマティクス

【講演要旨】

医薬品の開発は、10年以上の長い年月と、500億円以上の巨額の費用がかかると言われています。この医薬品開発の高コスト化は、製薬会社に対する直接の経済的負担になっているばかりでなく、超少子高齢化社会を迎える日本の医療費に対しても間接的影響を与えることになっています。つまり、開発費用が高くなれば高くなるほど、私たちが手にする薬の値段も高くなり、そのために、一部が税金でカバーされている医療費も高くなってしまいます。このことから、医薬品開発の効率化をはかり、開発コストを下げることは、製薬業界のみならず、日本の医療費問題にとっても重要な課題となっています。

では、何故、医薬品の開発費用はこれほど高くなってしまったのでしょうか？ その主要因の一つに、医薬品開発は、研究開発者の勘と経験、さらには運に頼るところが多く、成功率が2万分1であるために無駄な研究開発を行わざるを得ないという点が挙げられています。これに対し、近年では、人間の勘・経験・運に頼るのではなく、コンピュータによる科学的な解析と予測に基づいて医薬品開発を行うことによって、開発の成功確率を向上させることに大きな期待が寄せられています。しかしながら、コンピュータで正確な医薬品予測をするためには、体の中で起こる医薬品候補物質の反応を精密にシミュレーションする必要があり、このような計算は現状の汎用コンピュータでは20年の計算時間を要する非現実なものでした。一方、スパコン「京」は、この20年かかる計算を1週間程度で完了できる並外れた性能を有しており、スパコン「京」の出現により、より速く、より正確に、医薬品を予測することによって、より安く医薬品を開発することが現実味を帯びてきました。本講演では、演者が製薬会社11社とIT会社2社と共同で取り組んでいるスパコン「京」を用いた医薬品開発の研究プロジェクトを紹介することで、医薬業界におけるスパコン「京」のインパクトをお示します。