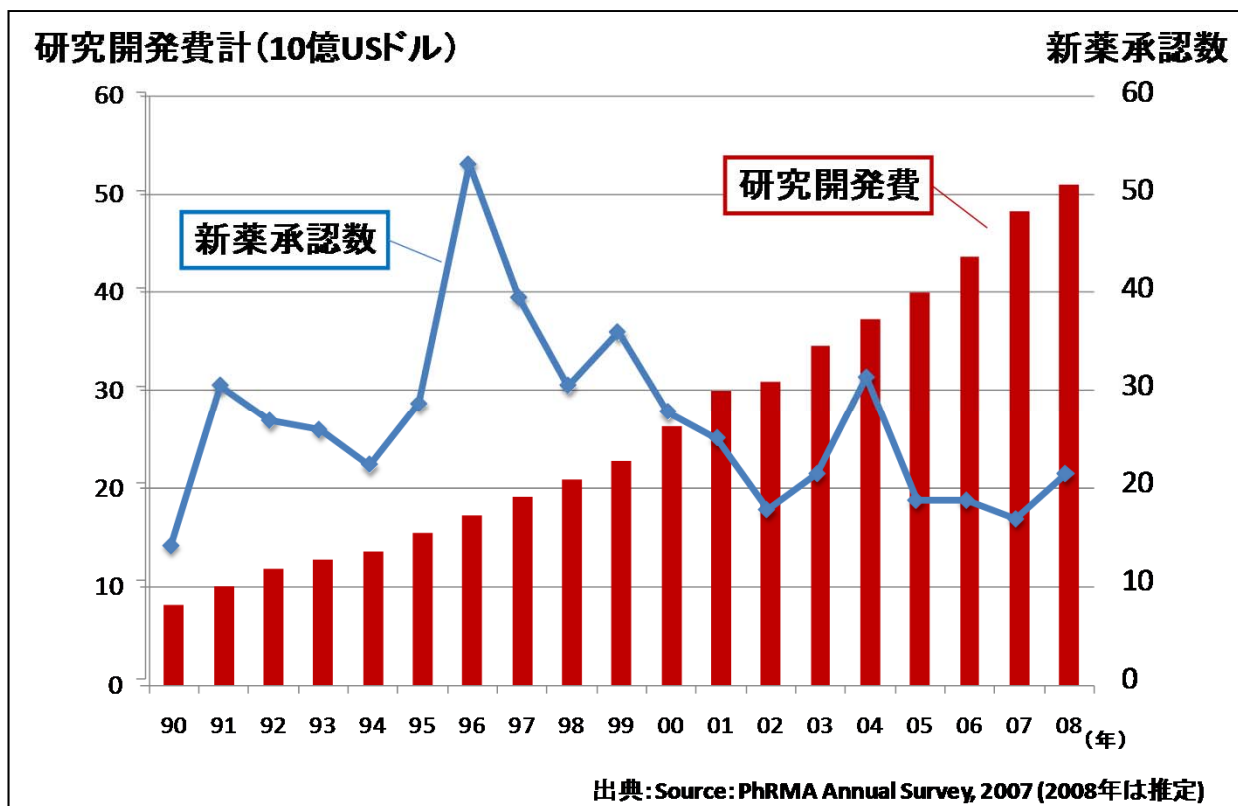
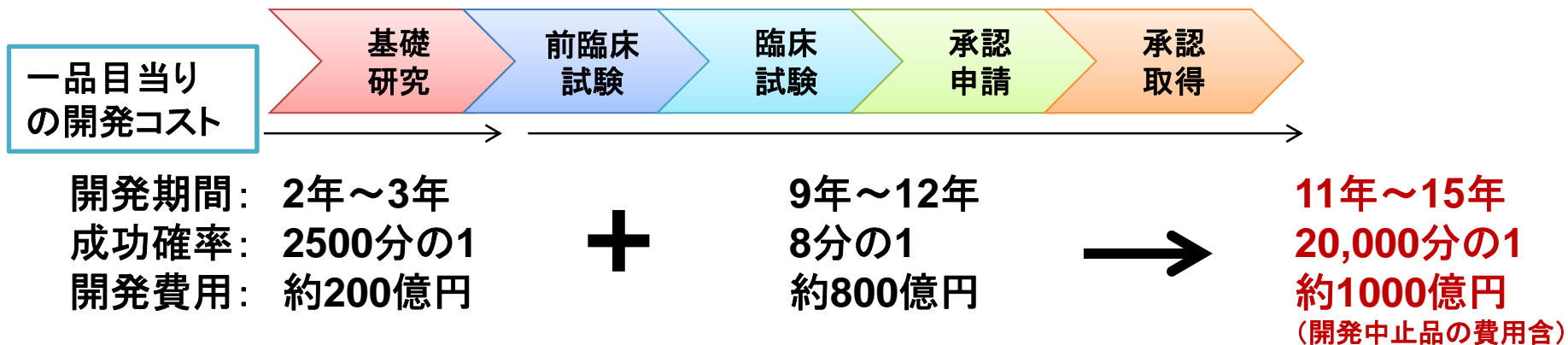


スパコンで目指す速い・安い・うまい薬づくり
～病気の原因分子と薬の作用を予測する～

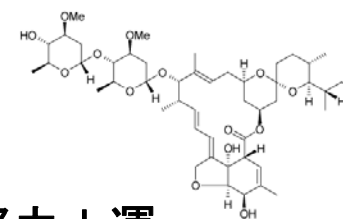
京都大学 医学研究科
理化学研究所 QBiC/AICS
先端医療振興財団 先端医療センター研究所
奥野 恭史

薬の開発はとても難しい



- 製薬企業の経営圧迫
- 希少疾患薬の枯渇
- 医療費の高騰

これまでとこれからの薬づくり



大村智先生



2015年
ノーベル医学生理学賞

1970年代から
各地の土壌を収集



努力+運

1979年、土壌に住む様々な微生物が作る物質から寄生虫に効く薬効成分を発見。熱帯病オンコセルカ症の特効薬「イベルメクチン」として、アフリカなどで年3億人を救っている。

私



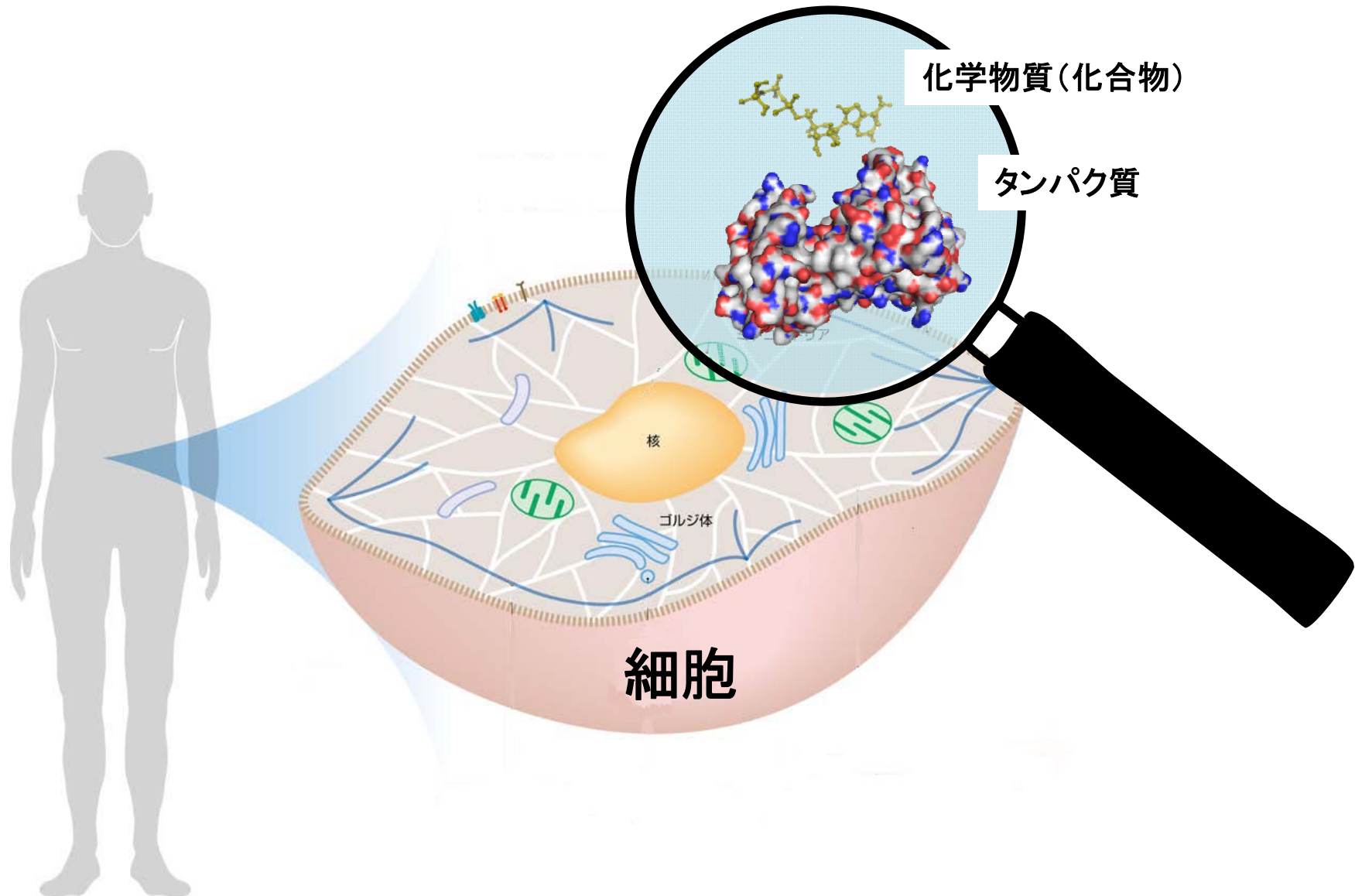
スパコンで薬効成分を探す



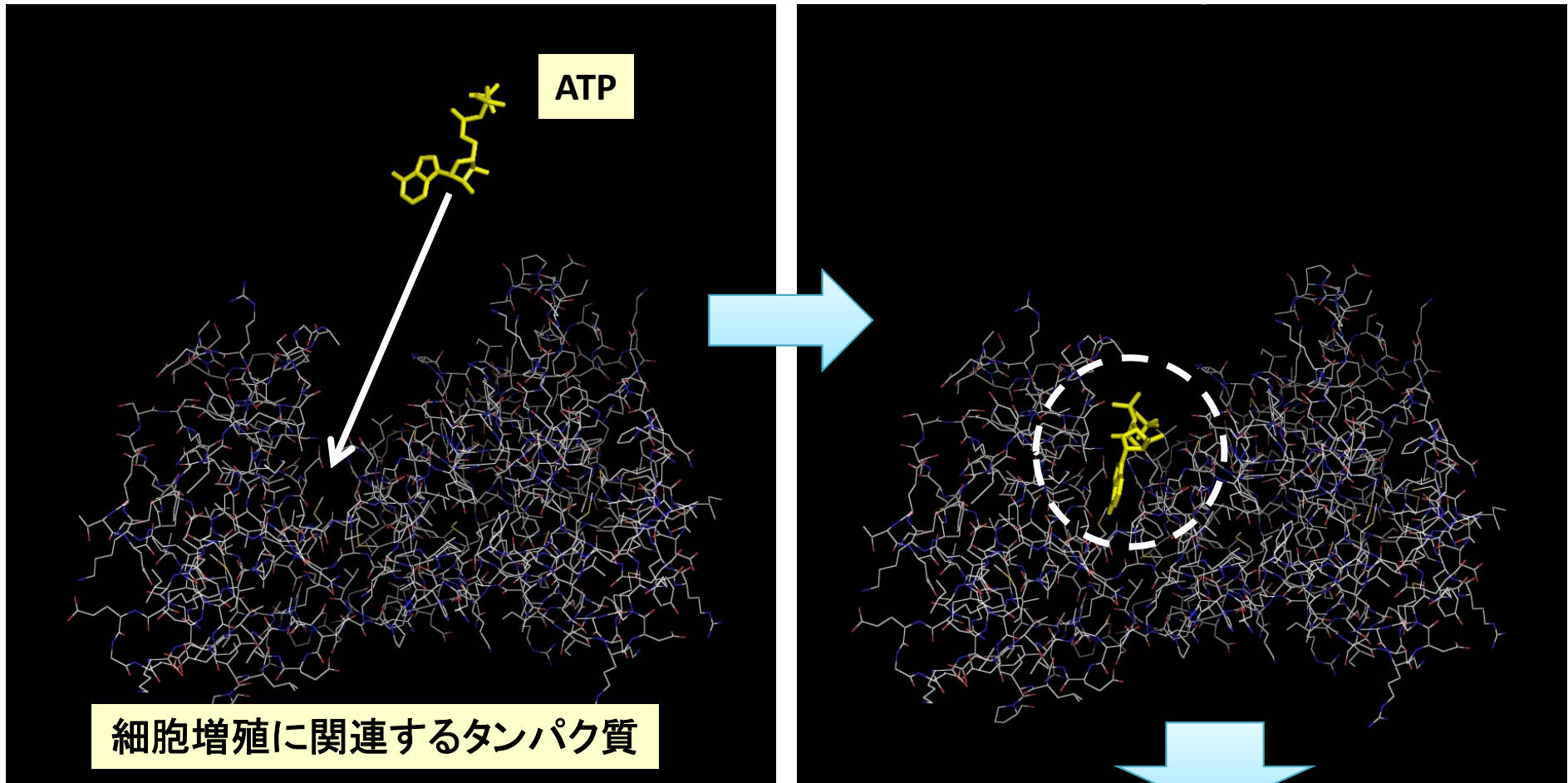
特効薬の無い病気はまだまだたくさんある。
これまでとは違う新しい薬づくりの方法が必要。
速い・安い・うまい薬づくりに挑戦。

薬づくりの考え方

体は、多くの細胞と色々なタンパク質などからできている



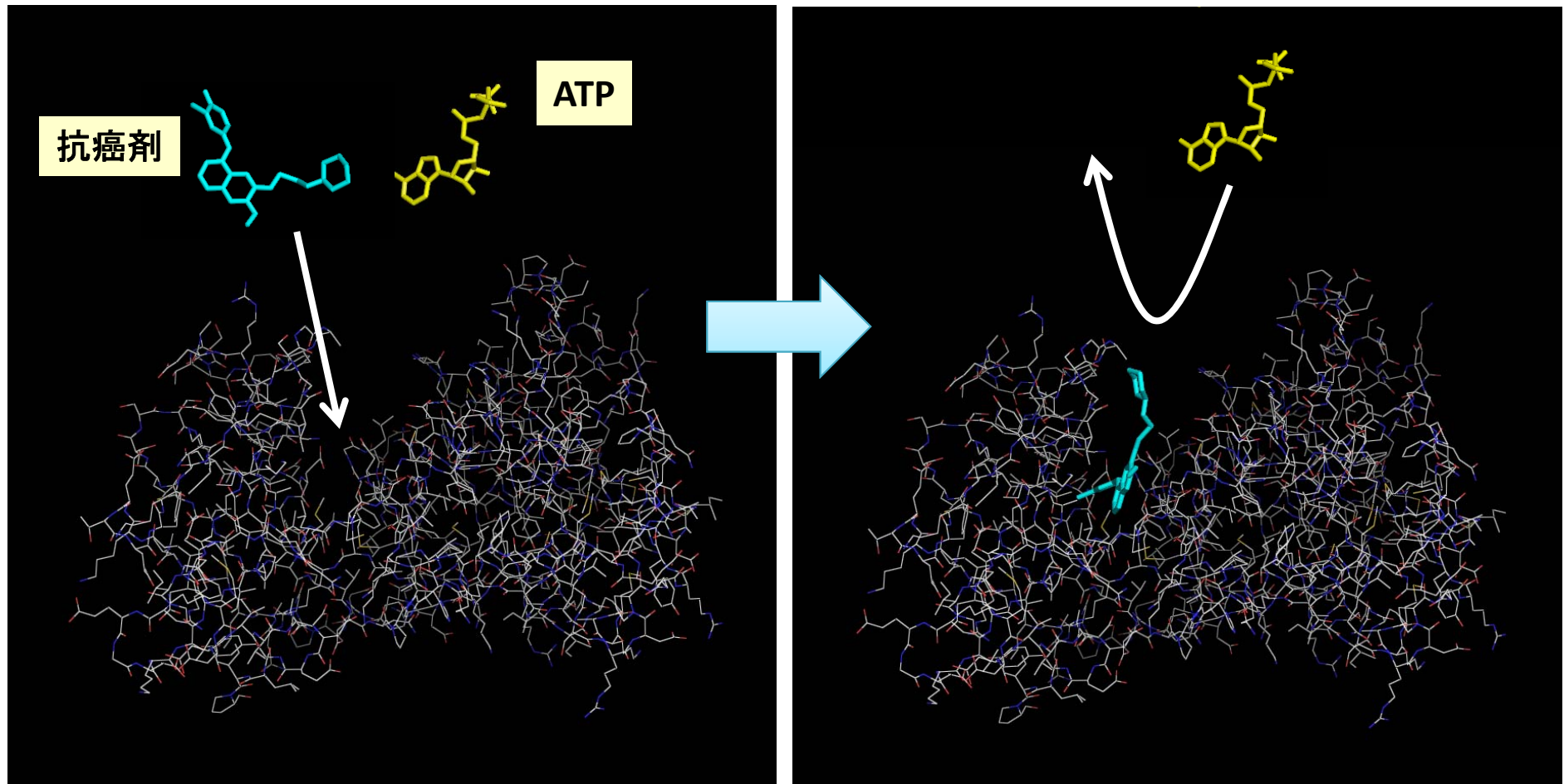
薬づくりの考え方



細胞増殖関連タンパク質に生体物質ATPが結合することにより、細胞が増殖する

癌は細胞が異常増殖する病気

薬づくりの考え方

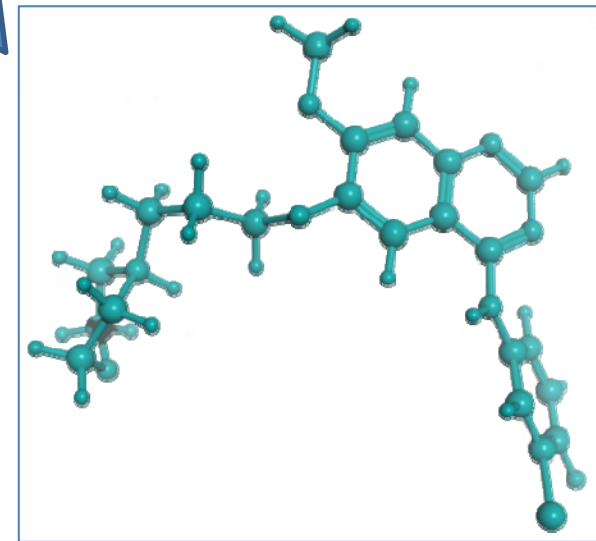
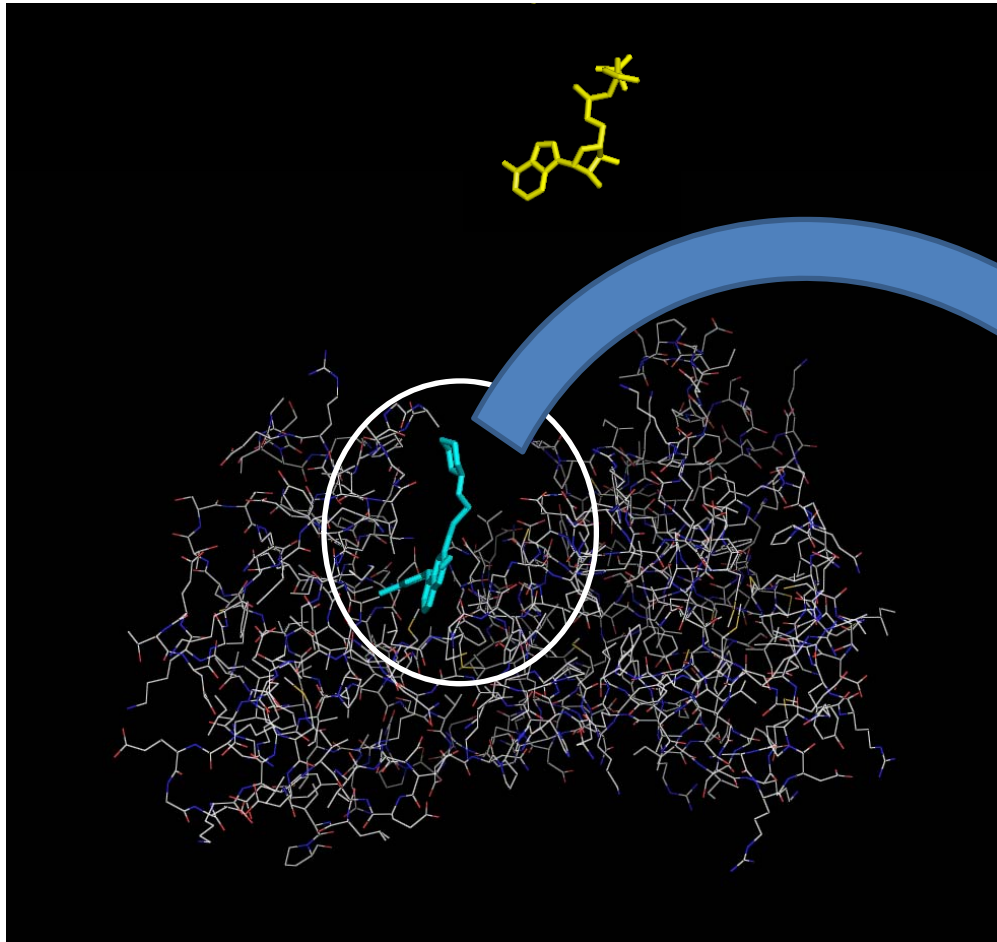


細胞増殖関連タンパク質とATPとの結合をブロックする化学物質があると、細胞増殖が止まる ⇒ 抗がん剤

創薬(薬づくり)とは、病気の原因タンパク質を見つけ出し、そのタンパク質に結合する(機能制御する)新規化学物質をつくることと言える

薬づくりのポイントとは？

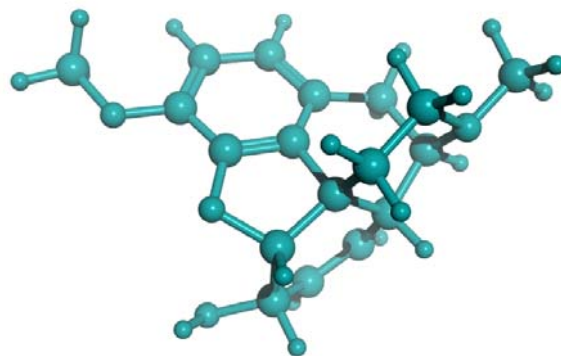
薬づくりとは、病気の原因タンパク質のポケットにしっかりと結合する化学物質をつくること



イレッサ

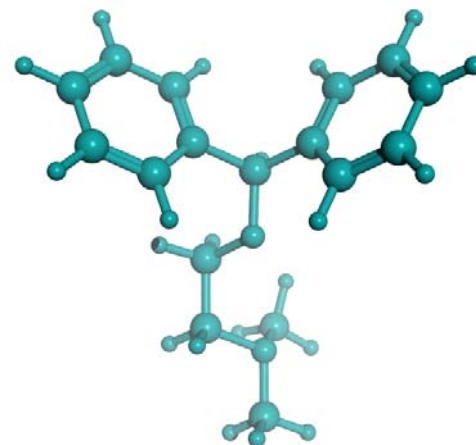
実際のクスリの 色々なかたち

コデイン



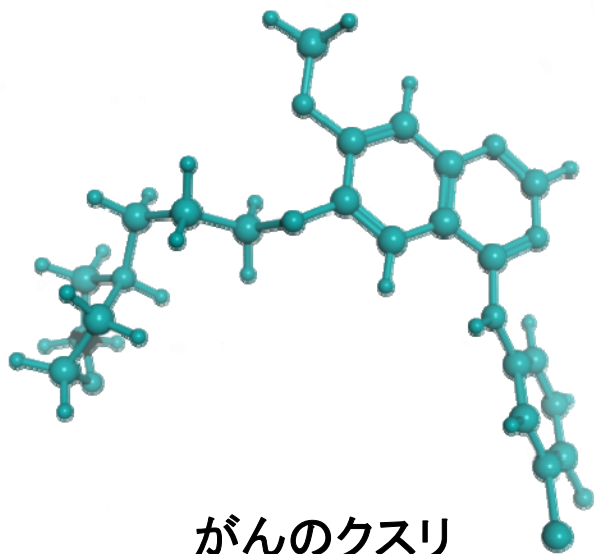
カゼのクスリ

ジフェンヒドラミン



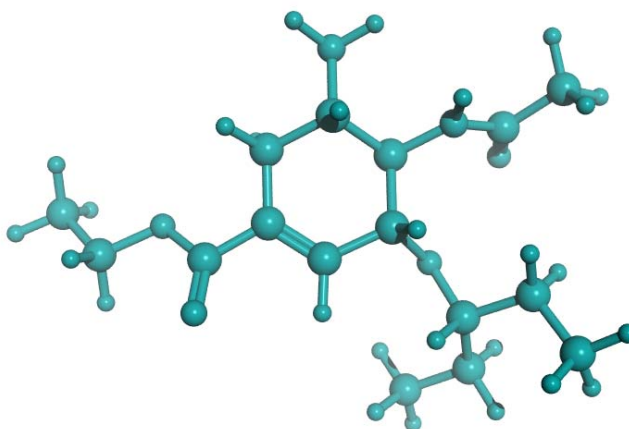
カゼ、花粉症のクスリ

イレッサ



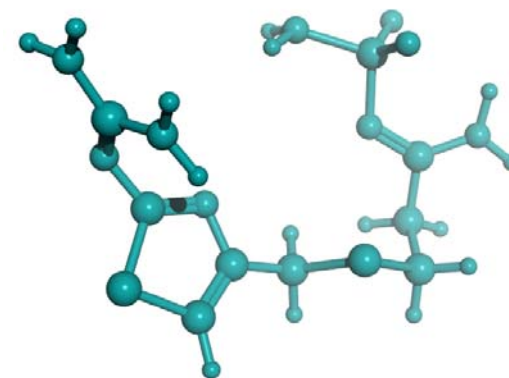
がんのクスリ

オセルタミビル



インフルエンザのクスリ

ファモチジン

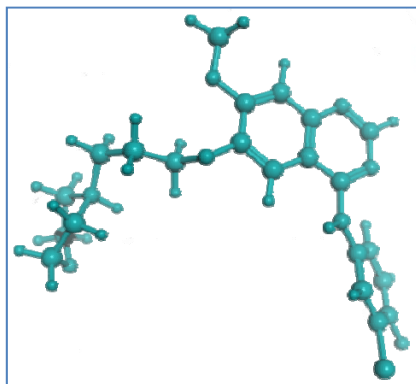


胃のクスリ

なぜ、薬づくりは難しいのか？

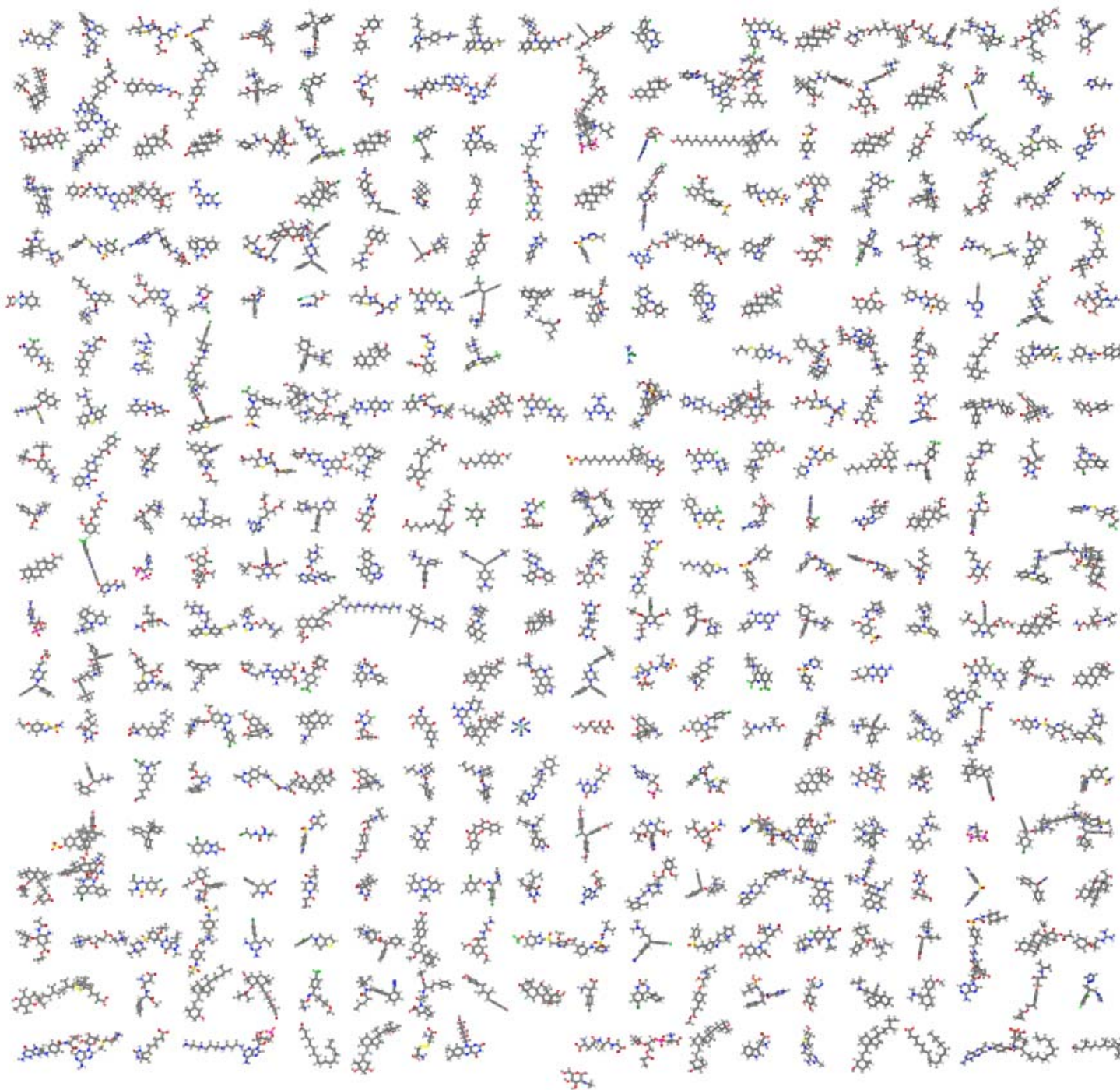
1. 薬の候補となる化学物質の形は無数にある
2. タンパク質は動いていて、形がコロコロかわる
3. タンパク質は一種類だけで働いていない

抗がん剤 イレッサを 探してみよう

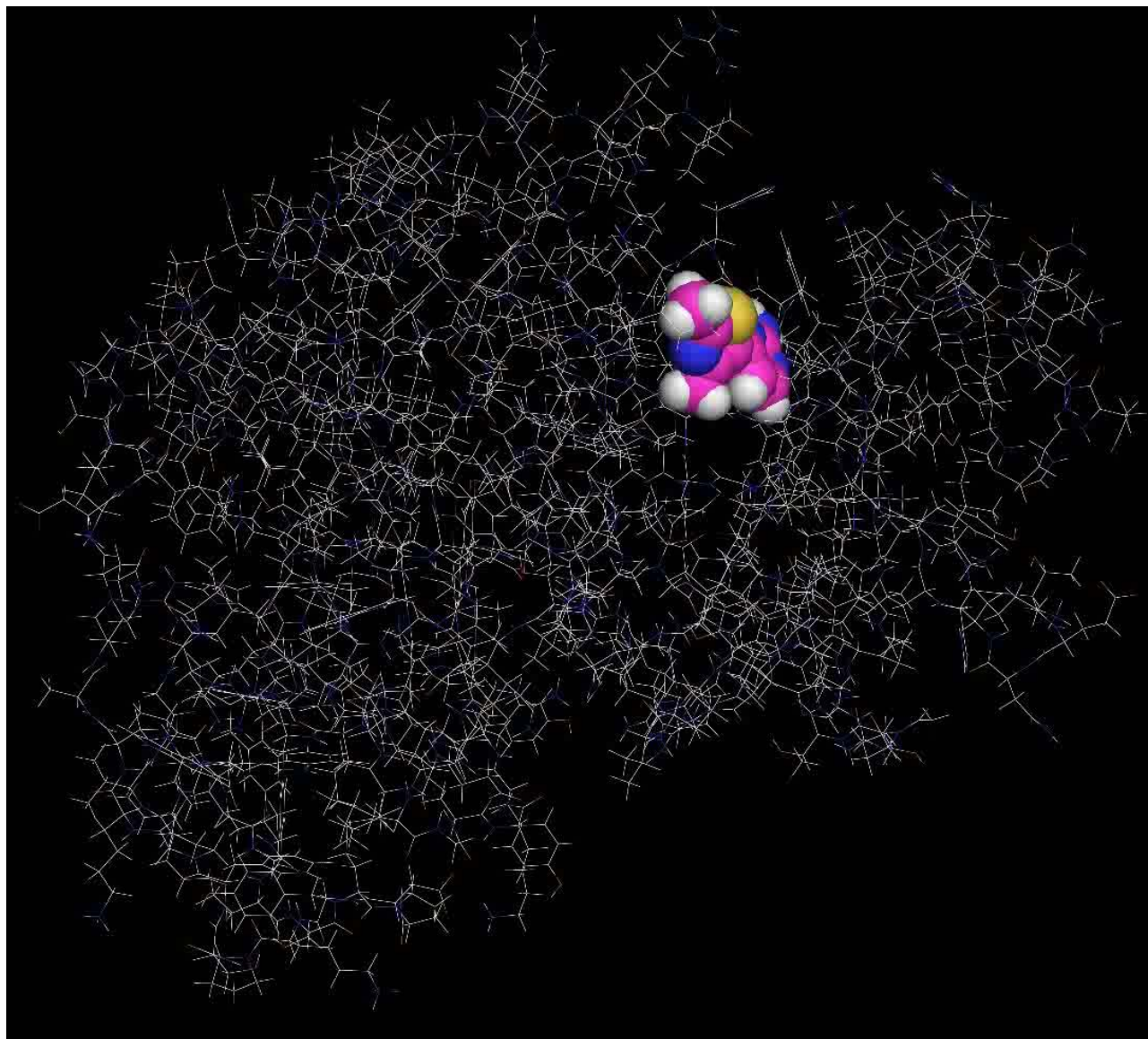


イレッサ

薬の候補となる
化学物質の形
は無数にある



コンピュータでタンパク質に結合する化学物質を探す



スーパーコンピュータを利用しない場合の予測正答率5%(100個中、5個しか当たらない)

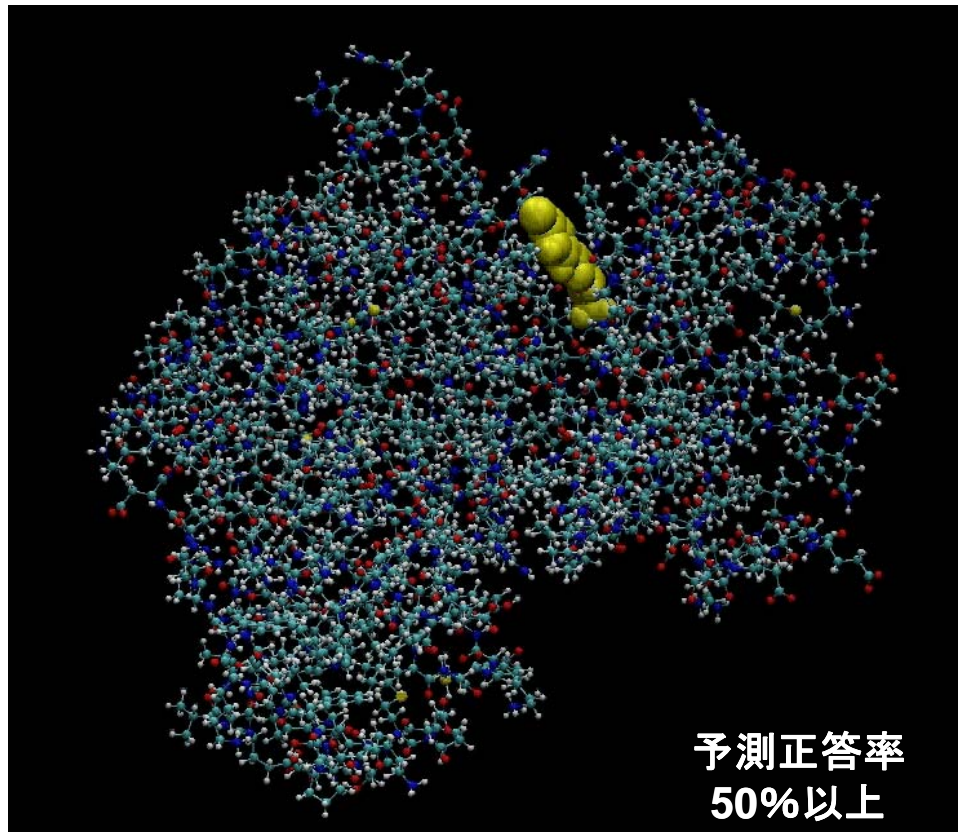
なぜ、薬づくりは難しいのか？

1. 薬の候補となる化学物質の形は無数にある
2. タンパク質は動いていて、形がコロコロかわる
3. タンパク質は一種類だけで働いていない

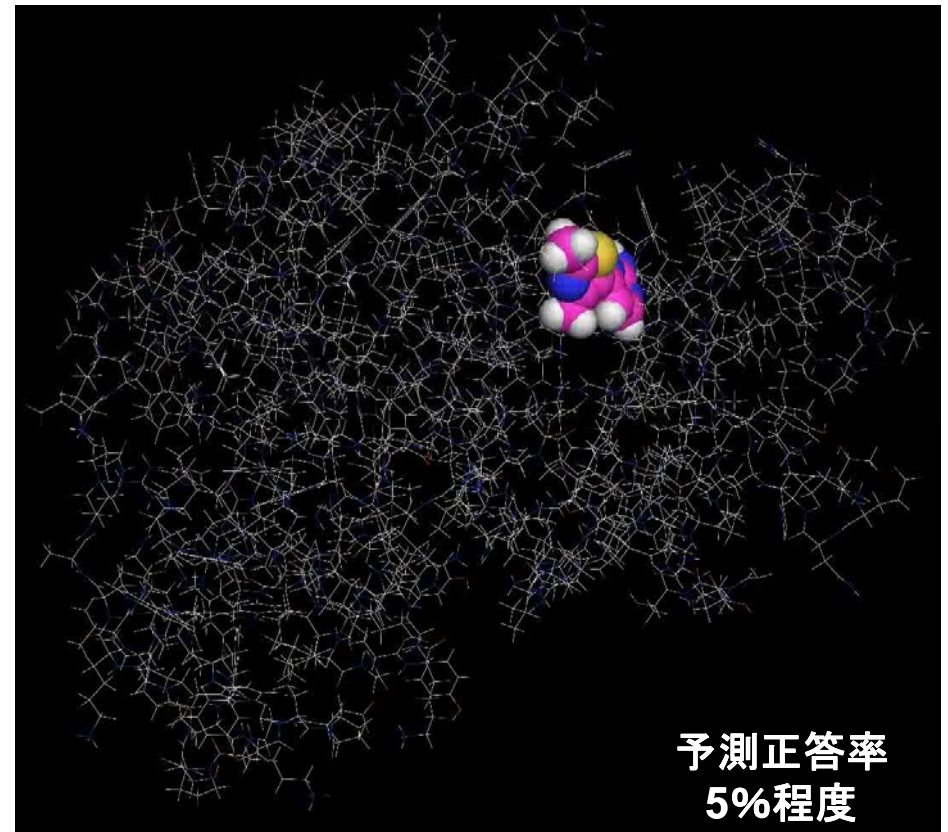
「京」の凄いところ

実際には、タンパク質は水の中で激しく動いているので、タンパク質の形の変化に合わせた化学物質を探さなければならない

「京」による結合シミュレーション



従来型の結合シミュレーション



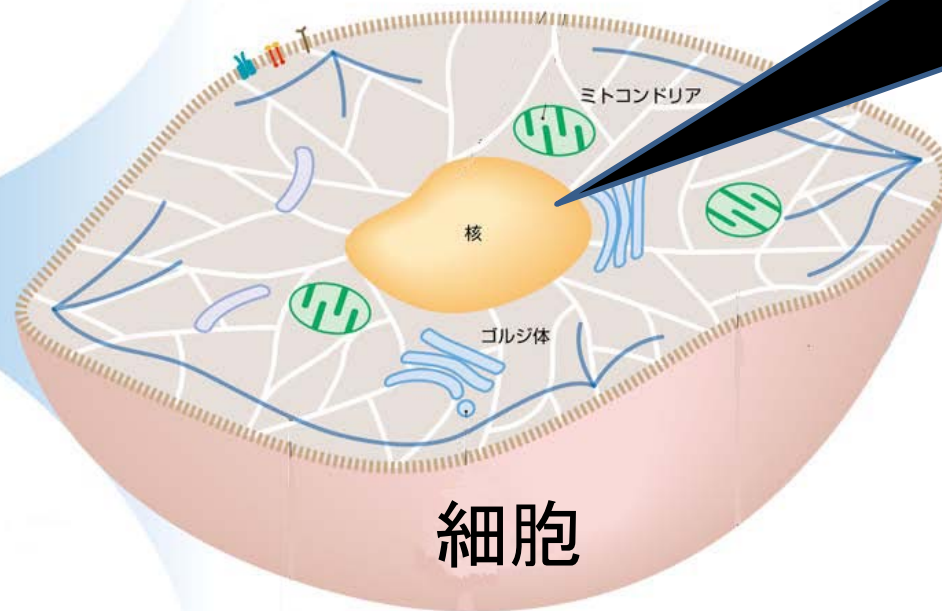
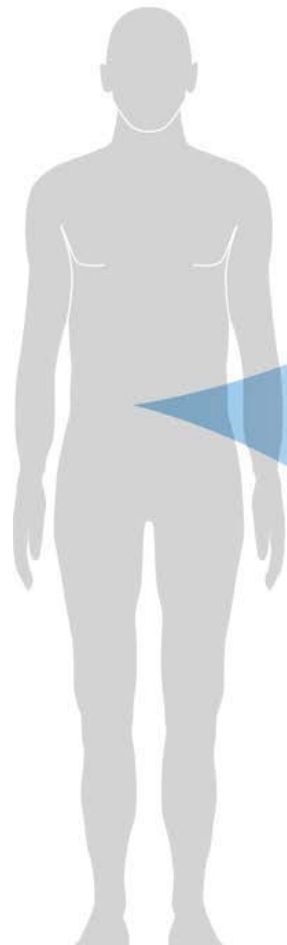
「京」を利用することで50%以上の予測正答率を実現！
タンパク質と数百種類の化学物質の結合を厳密に計算するのに
普通のコンピュータでは10年以上かかるが「京」は1週間で計算できる

なぜ、薬づくりは難しいのか？

1. 薬の候補となる化学物質の形は無数にある
2. タンパク質は動いていて、形がコロコロかわる
3. タンパク質は一種類だけで働いていない

細胞の中はもっと複雑:タンパク質は一種類だけで働いていない

細胞には色々な種類のタンパク質や
DNAなどのタンパク質以外の分子が複雑に絡み合っている



DNAや
様々なタンパク質

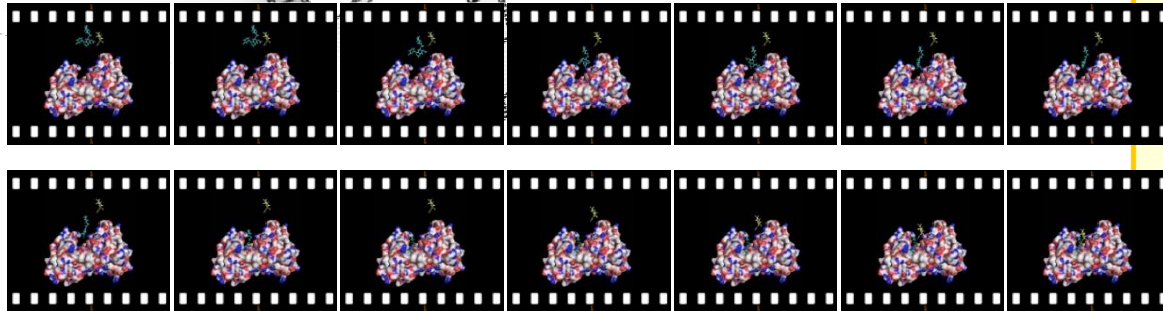


2020年始動 ポスト「京」は これまで困難であった薬の開発に新たな道を拓く

「京」では数十マイクロ秒間の体の中の分子の動きしか計算できなかったのが、**ポスト「京」ではミリ秒間の分子の動きが計算できるようになります。**
(「京」では1分間のワンシーンしか観ることが出来なかったのが、ポスト「京」では120分の映画のストーリーを観ることが可能になります。)



病気の原因分子と薬の働き
の動画を予測



これにより、病気の原因分子と薬の候補物質との新しい働きやこれまで知られていない作用が解明される可能性があります。

ポスト京によって
病気の原因分子と薬が作用するすべての様子が予測できるようになります。

これまで困難であった薬の開発に新たな道を拓く

治療薬の開発が困難な病気は
まだまだたくさんあります。

ポスト京によって、病気の原因分子と薬が作用するすべての様子が予測できるようになるため、**病気の原因分子と薬の候補物質との新しい働きやこれまで知られていない作用が解明される可能性があります。**

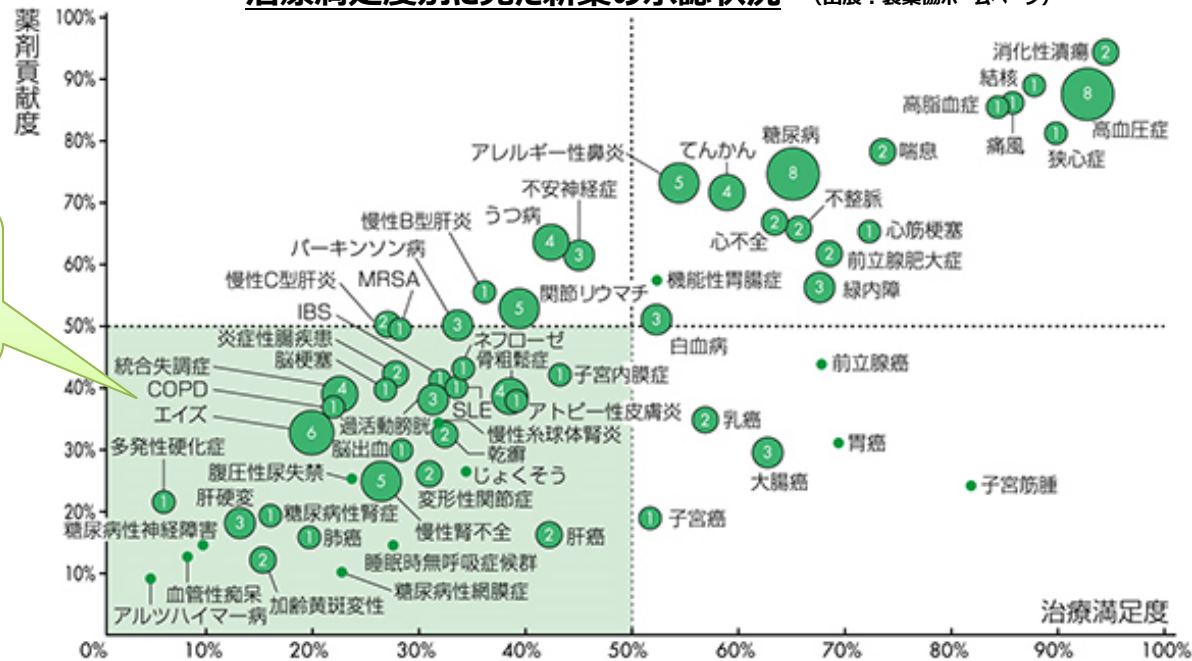
これにより、**がん、認知症、精神疾患**など今まで困難であった薬の開発に**新たな道を拓きます。**



さらに、薬の副作用を予測したり、**個人ごとに効き目のよい薬を選択することが可能となります。**

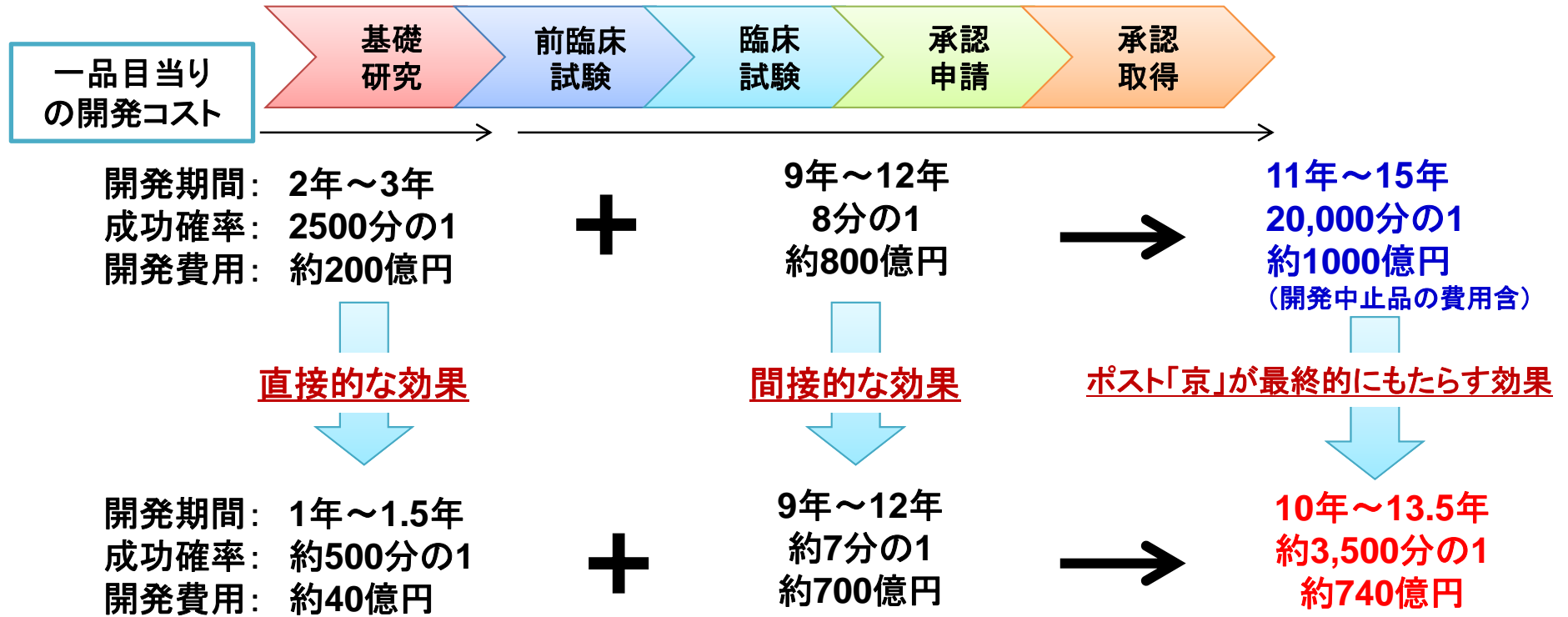


治療満足度別に見た新薬の承認状況 (出展：製薬協ホームページ)



治療薬が
不十分な病気

製薬会社22社と目指すスパコンによる創薬イノベーション



開発期間の短縮(約2年間短縮)と費用削減(一品目当たり約200億円削減)を目指す。
スパコンによって、より速く、より正確に、より安く医薬品をつくる。