

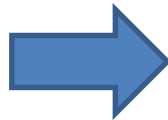
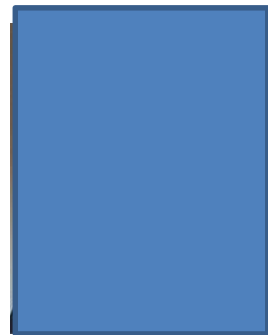
スパコンで薬をつくる

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

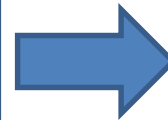
薬づくりはとても難しい

開発期間： 10年以上
開発費用： 1000億円以上
成功する確率： 3万分の1

大村智先生

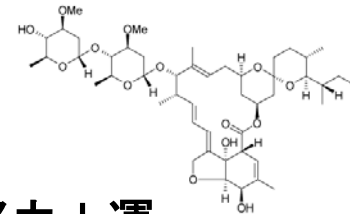


1970年代から
各地の土壌を収集



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1年間で3億人を救っている。



2015年
ノーベル医学生理学賞

これまでとこれからの薬づくり

私

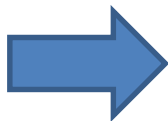
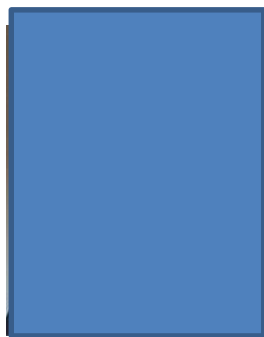


スパコンで薬効成分を探す

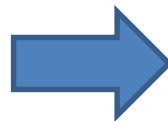


特効薬の無い病気はまだ
まだまだたくさんある。
これまでとは違う新しい薬
づくりの方法が必要。
速い・安い・うまい薬づくりに
挑戦。

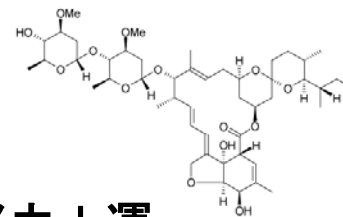
大村智先生



1970年代から
各地の土壌を収集



努力+運

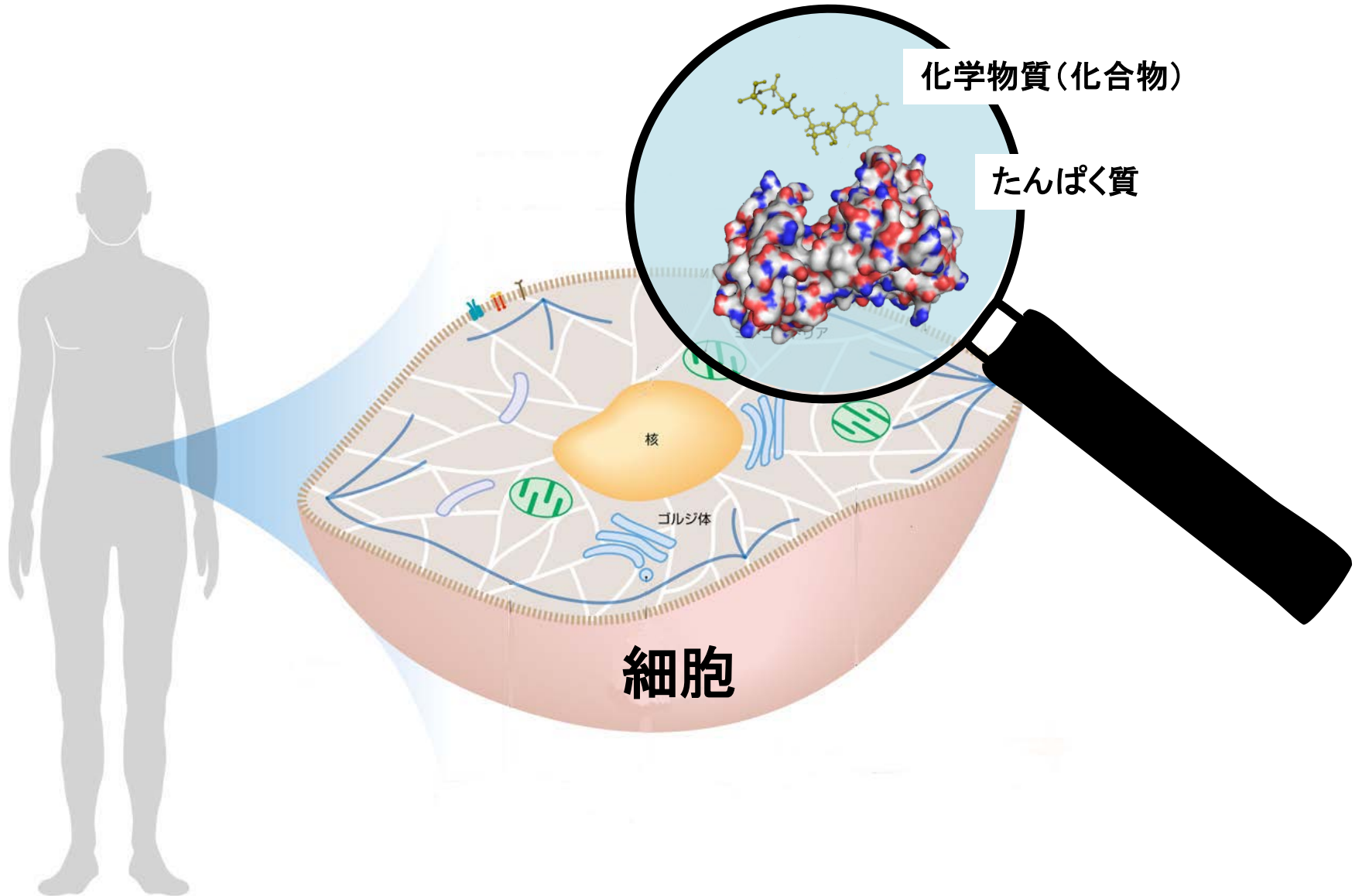


1979年、土壌に住む様々な
微生物が作る物質から
寄生虫に効く薬効成分を発見。
熱帯病オンコセルカ症
の特効薬「イベルメクチン」
として、アフリカなどで1年
間で3億人を救っている。

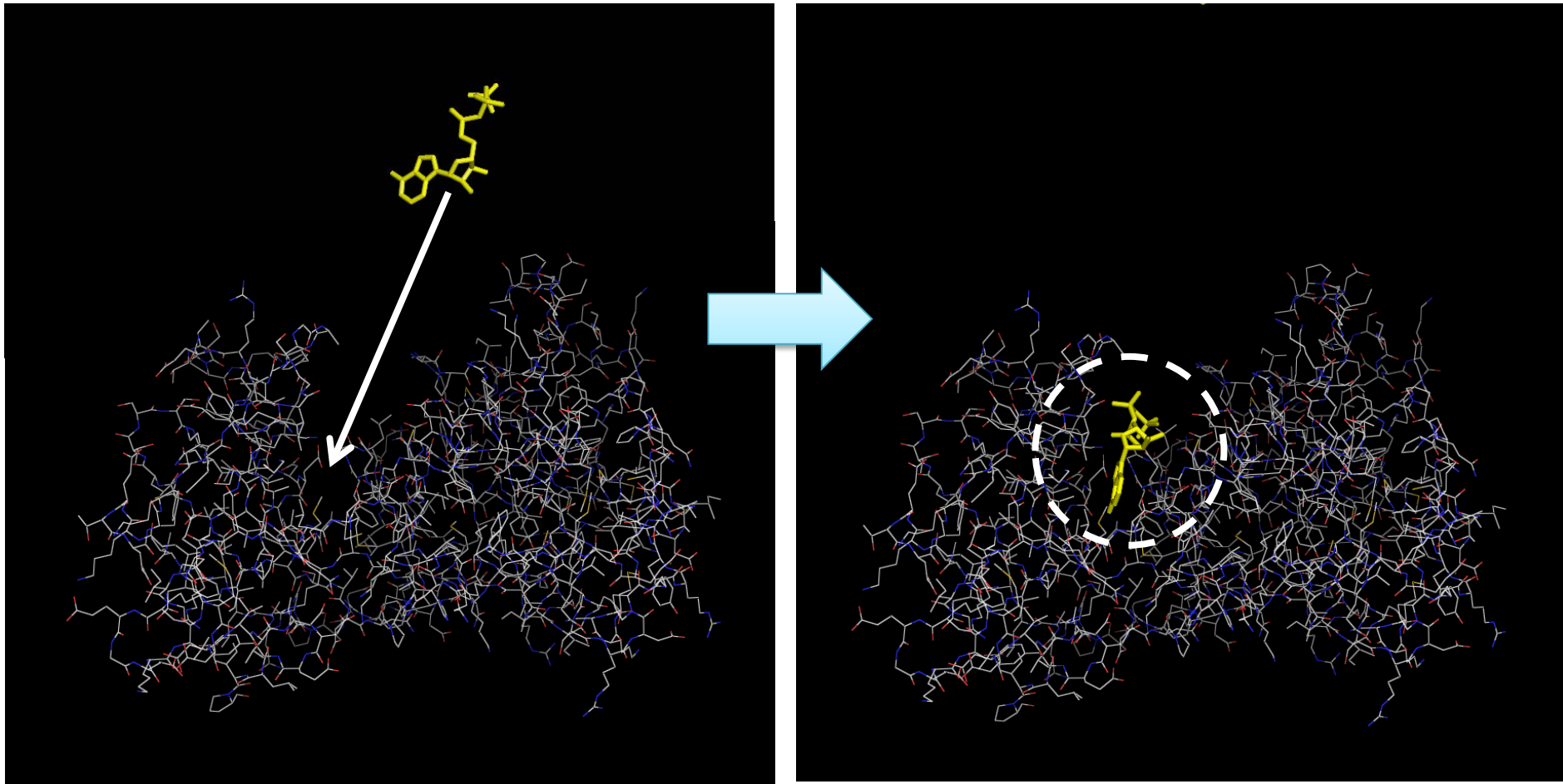
2015年
ノーベル医学生理学賞

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

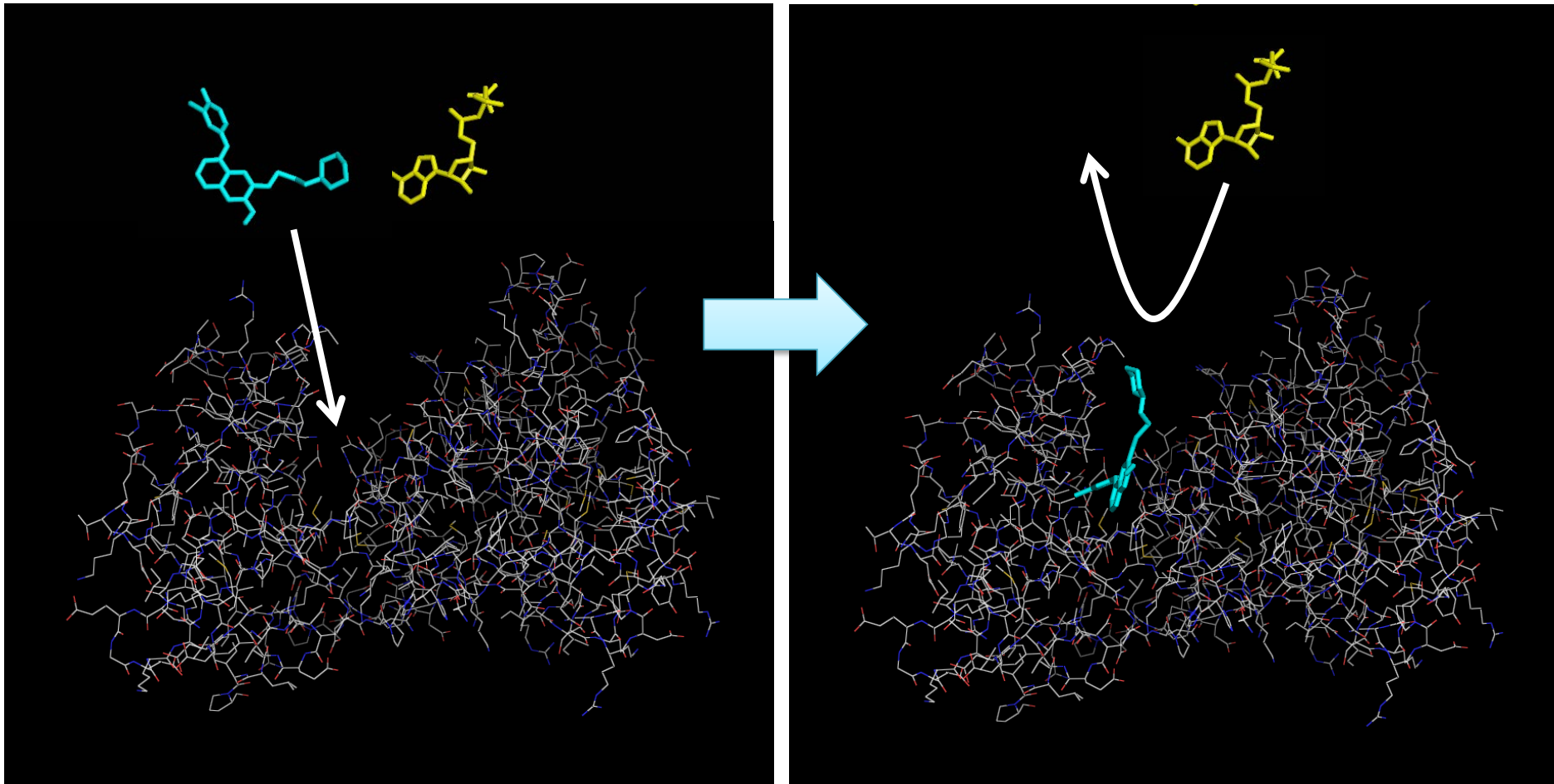


薬づくりの考え方



黄色の物質が、悪いたんぱく質にくっつくと病気になる

薬づくりの考え方

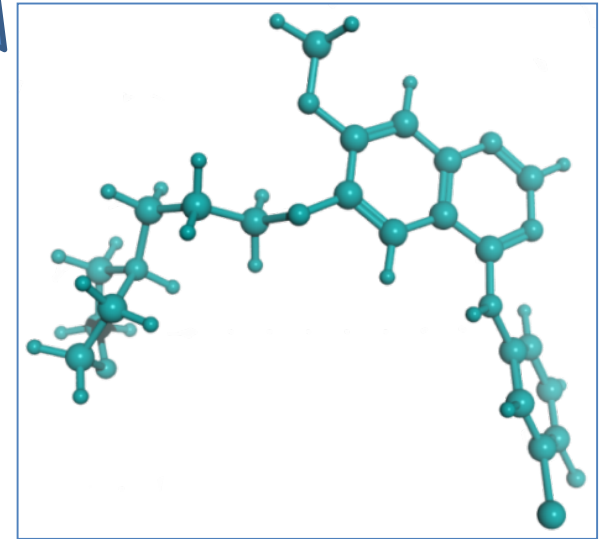
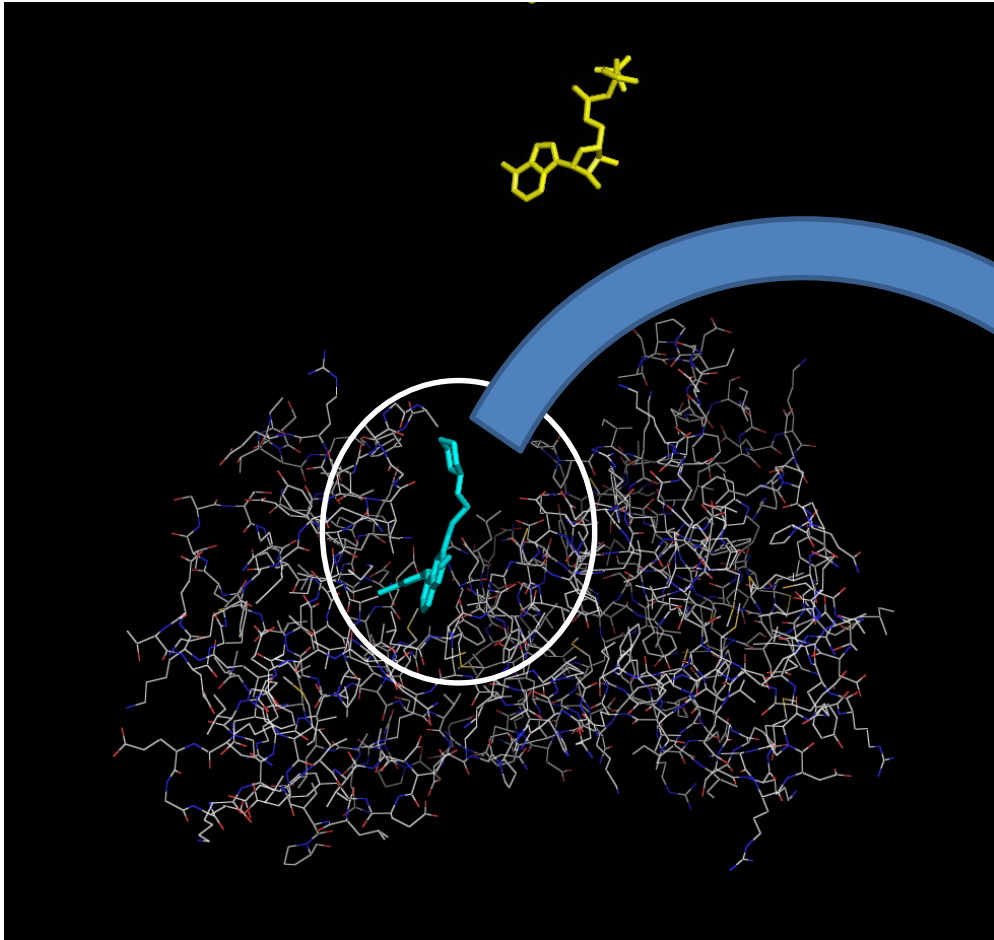


黄色の物質が、悪いたんぱく質にくっつくと病気になる

黄色の物質が、悪いたんぱく質にくっつかないように
青い物質でブロックすると病気にならない

薬づくりのポイントとは？

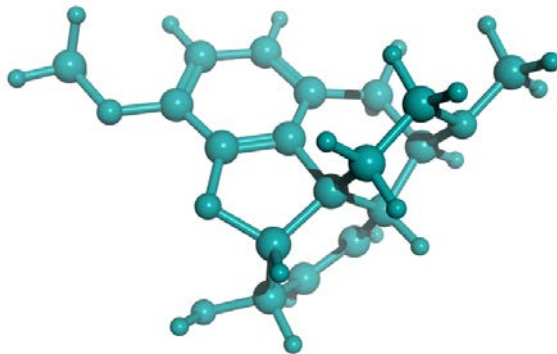
薬づくりとは、病気の原因タンパク質のポケットにしっかりと結合する化学物質をつくること



イレッサ

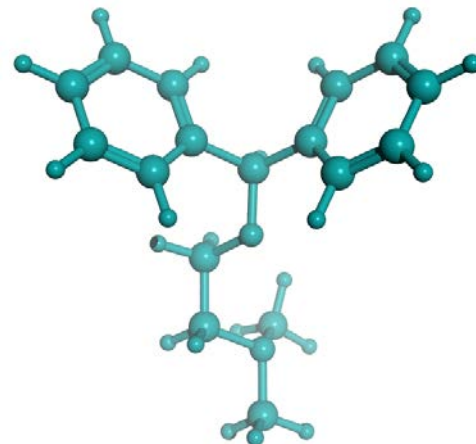
実際の薬の 色々なかたち

コデイン



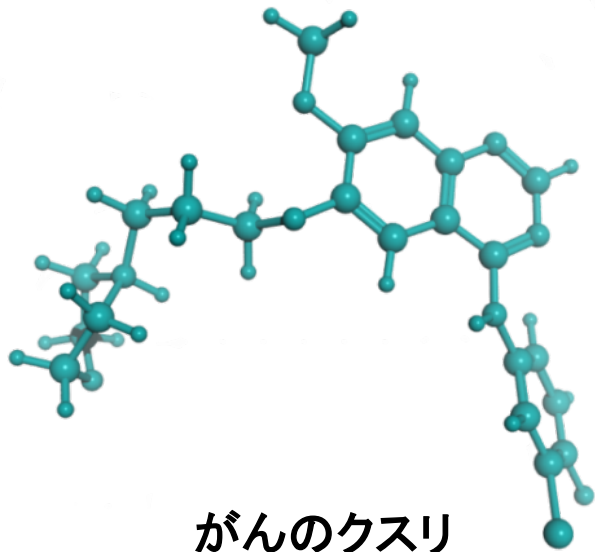
カゼのクスリ

ジフェンヒドラミン



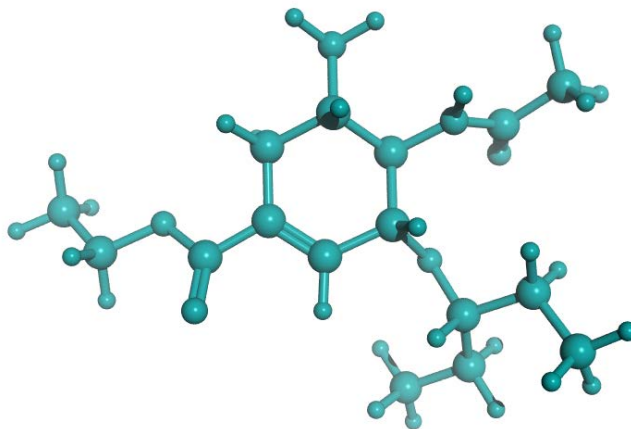
カゼ、花粉症のクスリ

イレッサ



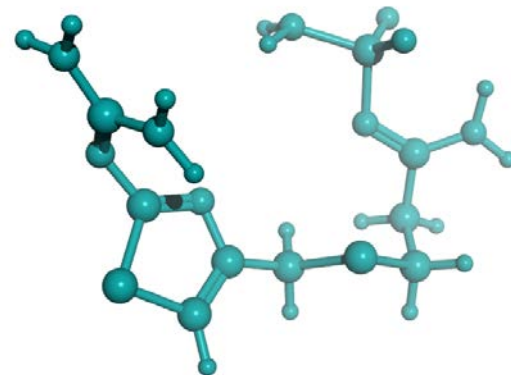
がんのクスリ

オセルタミビル



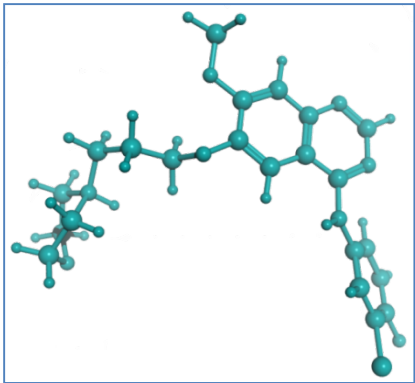
インフルエンザのクスリ

ファモチジン



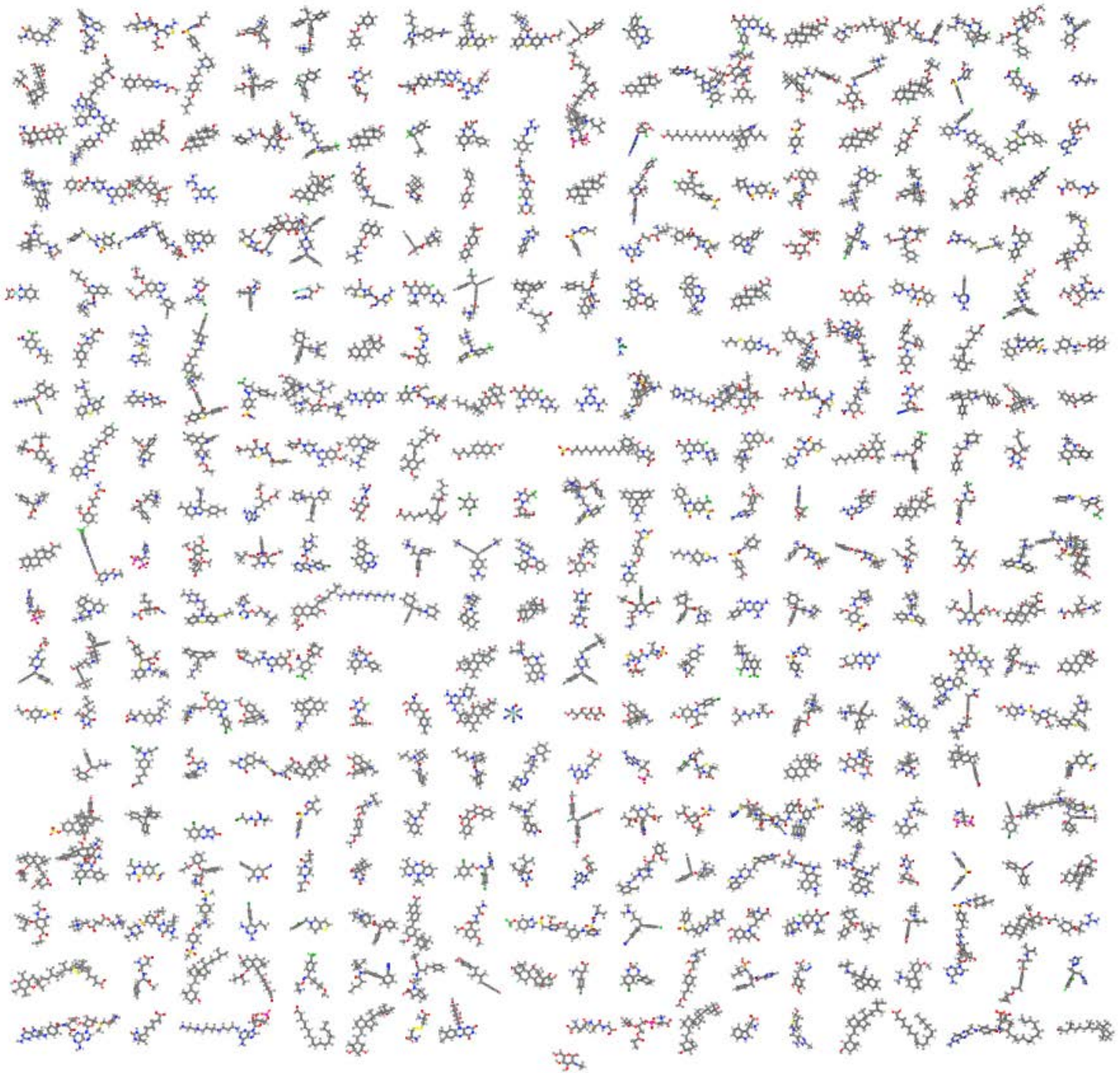
胃のクスリ

がんの薬を 探してみよう



イレッサ

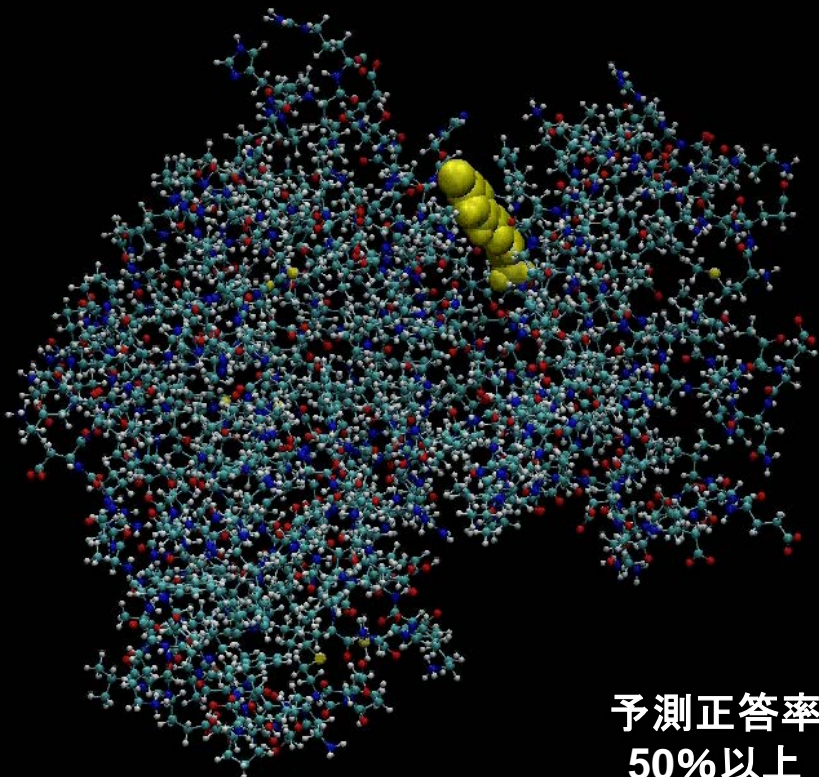
薬の候補となる
化学物質の形
は無数にある



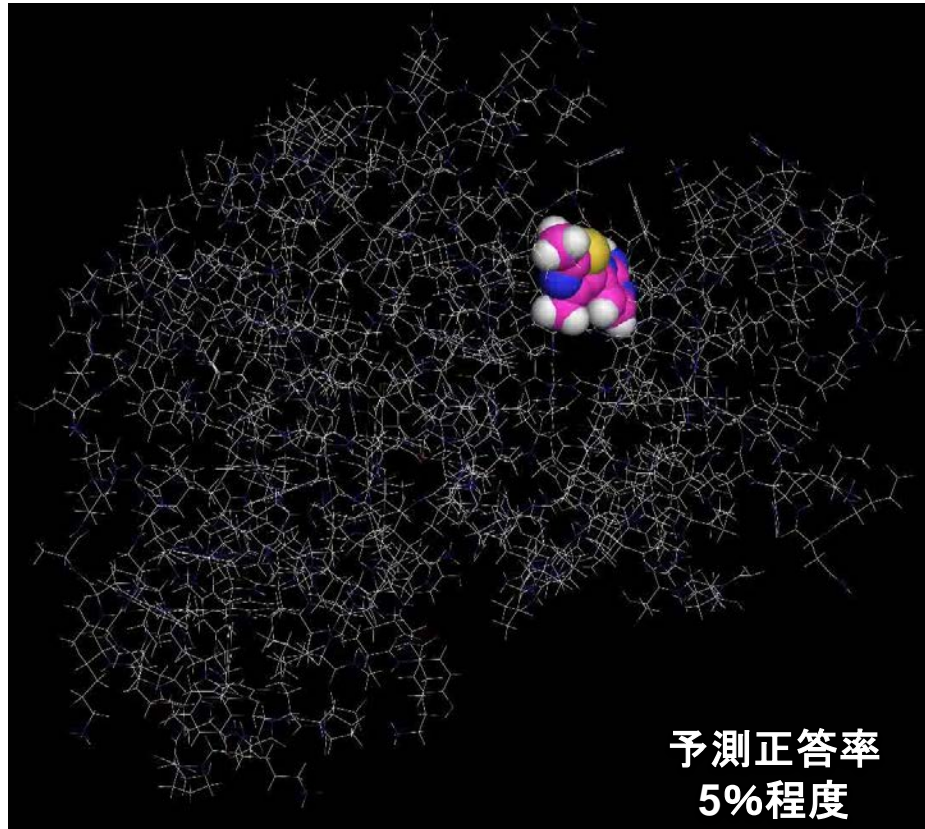
「京」で薬をつくる

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」による計算



普通のコンピュータでの計算



「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

「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」

ポスト「京」重点課題1って？

重点課題1のターゲットは「創薬」です。

ここ十数年、製薬業界では新薬の創出が低迷し、開発費が増え続けているという深刻な課題に直面しています。それは、つくりやすいタイプの薬はすでに開発され、つくるのが難しいタイプが残ってしまったことが大きな原因の一つだといわれています。病気の原因となるタンパク質などに結合して、その機能を制御する分子が薬となります。たくさんの分子の中から標的のタンパク質だけに強く結合する薬の候補分子を探し出し、薬効を上げ、副作用を軽減するための実験に大きなコストと時間が掛かっています。ポスト「京」を用いてそれらの実験をコンピュータシミュレーションに置き換えることで、開発プロセスの効率化、開発費の低減、さらには薬のつくり方を革新し、薬効が高く副作用の少ない新薬の創出を促進します。

6F

講堂

C 神戸スパコンシミュレーション王国



ムービー見に来てね

計算科学研究機構 一般公開 2016

ポスト「京」重点課題1 おすすめコース

2016年11月5日

C8 スーパーコンピュータで目指す 速い・安い・うまい薬づくり

ポスト「京」を使って、体を構成するたくさんの分子を一度に計算し、体の中のしくみや、体の中で薬がどのように働くかを再現・予測します。ここでは、スパコンを使った薬の作り方を紹介するよ！



おすすめはここ！
研究者たちが研究紹介をします。

F3 コンピュータでたんぱく質に触ってみよう！

お肉や大豆に含まれているたんぱく質は、どんなかたちをしているのだろう。さわってたしかめたいと思わない？ コンピュータの中のたんぱく質を押したり伸ばしたりして、ミクロな世界の神秘にふれてみよう。

1F

セミナー室



G ミニ講演会 F AICS研究紹介

ここも
おすすめ！

14:30 スパコンで薬をつくる
重点課題①
生体分子システムの機能制御による
革新的創薬基盤の構築
14:45

G ミニ講演会 \ 15分で分かる! スパコンの世界 /

大好評! 「京」を運用している技術者、「京」を使って研究をしている研究者たちがミニ講演会形式でわかりやすく紹介します。1回15分、入退室自由なので、気軽に聞いていただけます。

計算科学研究機構
理化学研究所生命システム研究センター
ポスト「京」公開講座
生体分子システムの機能制御による
革新的創薬基盤の構築
<http://scidd.riken.jp/>