



スマート創薬 研究ユニット

Advanced Computational
Drug Discovery Unit

概要

創薬の対象とされる化合物の物理現象や物性を分子の動きの計算によって解析する分子シミュレーション。生物学のデータを情報科学の手法により解析するバイオインフォマティクスやシステムズバイオロジー。従来は個別に行われていたこれらの情報技術(IT)による手法での開発を統合し、東工大の強みであるスーパーコンピュータ「TSUBAME」を用いた大規模GPU計算を駆逐することで、学術的立場からの創薬へのIT支援技術を開発する。そこに、製薬企業等による生化学実験を相互補完的に融合させて「スマート創薬」の手法を確立し、産業界との連携のもと、オープン・イノベーションによるアカデミア創薬の実現を目指す。

研究目標

大学と企業とのコラボレーションによって創薬を進めていく考え方と手法は、今後の創薬開発において必須である。本研究ユニットは、オープン・イノベーションによるスマート創薬の実現を目標に掲げ、まずはそのための「オープンな創薬環境の構築」について、5年以内の実現を目指す。具体的には、(1)東工大と製薬企業数社のメンバーとの間で創薬環境をオープンに活用、(2)完全なオープン参加型の「創薬コンテスト」を実施、(3)社会人向けのIT創薬人材養成コースでの教育を実施、以上3つのテーマを軸に、スマート創薬のモデル構築を実現していく。



ユニット・リーダー

関嶋 政和 (Masakazu Sekijima)

Profile

2002年3月 東京大学 大学院農学生命科学研究科 応用生命工学専攻 博士課程修了 博士(農学)
2002年4月 独立行政法人 産業技術総合研究所 生命情報科学研究センター 分子情報科学チーム 産総研特別研究員
2003年7月 同 生命情報科学研究センター タンパク質機能チーム 研究員
2007年4月 同 生命情報工学研究センター 分子機能計算チーム 研究員
2008年4月 同 企画本部 研究分野総括チーム 企画主幹
2009年4月 東京工業大学 学術国際情報センター 国際共同研究分野 准教授
2010年7月 同 学術国際情報センター 大規模データ情報処理分野 准教授
2016年4月 同 科学技術創成研究院 准教授

メンバー

●秋山泰 教授 ●小長谷明彦 教授 ●石田貴士 准教授
●仙石慎太郎 准教授 ●本間光貴 特定准教授 ●大上雅史 助教

スマート創薬研究ユニット



情報科学技術と生化学実験を融合する「スマート創薬」の実証研究とオープンプラットフォームの形成を目指す、東京工業大学の新しい研究ユニットです。

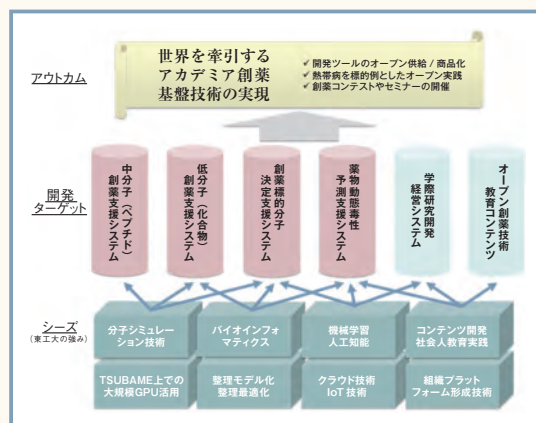
オープンな創薬の考え方は これからの時代のトレンドとして 他の分野にも応用できる

Q なぜこの研究ユニットを作られたのですか？

製薬会社にとって、創薬とは1つの薬に約3000億円とわけて高額な開発費がかかる上に、情報の流出が命取りになることから非常に秘匿性が高く、一般的には企業の創薬担当者と我々研究者との間で、本音での会話がなかなか成り立たないという問題を抱えています。加えて、「時は金なり」の精神が息づいており、挑戦しても僅かな期間で結果が出ないとすぐに開発を断念してしまう傾向があります。また、失敗事例の蓄積や相互補完が活発でなく、肝心の情報解析も人手が不足し、現代に馴染まない旧来の手法に依存している状態です。こうした状況を打破すべく、大学とベンチャー企業とがタッグを組んで創薬技術のオープン化・共通化を主導していこうというのが、本研究ユニット立ち上げの経緯となっています。

Q この研究ユニットの強みを教えてください

企業の創薬担当者とのノウハウ交流を行い、本音での議論を重ねてきたことです。それがなぜ私たちのグループでできているのかというと、患者の経済的問題から治療薬の開発が不十分な「顧みられない熱帯病」(NTDs)という、「社会貢献事業」を創薬の対象の一つに設定したコンソーシアムを運営してきたからです。企業と大学が連携して新薬開発を進めるアカデミア創薬を行う上でも、これまでのノウハウの交流や本音での議論は非常に重要な意味を持ちます。加えて、オープンな創薬の考え方は、これからの時代のトレンドとして、他の分野にも応用できると考えています。さらに、創薬の対象となる化合物の抽出には、東工大が世界に誇るスーパーコンピュータ TSUBAME をフル活用できることも大きな強みです。抽出した化合物で生化学実験を行うコラボレータと連携して実験を重ねていくことで、効率的な創薬ができると考えています。



Q 研究目標を達成する道筋を教えてください

実施スケジュールとしては、2016年4月に企業コンソーシアム発足、以後5年の間にオープン参加型の「創薬コンテスト」を継続的に開催します。さらに、「社会人向けIT創薬人材養成コース」、インド工科大学マドラス校などの海外有力大学とのシンポジウムについても実施をし、それぞれに活発な交流を重ねることで、大学と企業との連携のみならず、高度なスキルを持った人材の輩出にも貢献できるようなオープンな創薬環境の構築を目指します。一方、技術面では複数創薬手法のTSUBAMEへの移植、オープン開発用サーバの構築と成果の共有・比較、開発されたプラットフォームの利用による創薬応用を実施し、盤石な創薬研究・開発基盤の確立にも力を注ぎます。

お問い合わせ

東京工業大学
スマート創薬研究ユニット

〒226-8501 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259 J3棟 409号室
Tel : 03-5734-3325 Email : sekijima@c.titech.ac.jp
Web : <http://www.bio.gsic.titech.ac.jp/acdd/>