

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 医薬品創薬から製造までのビッグデータからの知識創出基盤の確立

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

船津 公人（東京大学大学院工学系研究科 教授）

主たる共同研究者

奥野 恭史（京都大学大学院医学研究科 教授）

泰地 真弘人（理化学研究所生命機能科学研究センター チームリーダー）

堀 憲次（山口大学大学院創成科学研究科 教授）

杉本 雅則（北海道大学大学院情報科学研究科 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

①合成反応を考慮したシミュレーションによる薬剤候補となりうるリガンド化合物の大規模仮想ライブラリの構築と、②病気の原因となるタンパクに対して、これを抑制するリガンドとのドッキングをシミュレーションではなく、システムテックに多数の特徴量を定義し、同時に学習データとしてドッキングに関する既知の約300万件のデータベースを用いることにより、機械学習、特にディープ・ラーニングで置き換えて、リガンド化合物の大規模仮想ライブラリから薬剤候補となり得る候補リガンド化合物の選定を高速に行う技術を確立した。③候補リガンドの合成可能性に関して量子化学計算によるインシリコ・スクリーニングを行う技術開発も進めている。④こうして得られた化合物の製造プラントの制御に関して、ソフトセンサの技術を基盤に、モニタリングと制御の基盤技術を実用化レベルで開発した。一方で、①を用いた②の結果を③で検証し、④で製造プロセスの制御に反映するという、システム統合化に関しては、まだ十分な成果には至っていない。また、②において、ドッキング・サイトが複数存在するようなpromiscuityの扱いに関しては、最終年度に対応技術の研究開発が始まったが、まだ充分とは言えない。フェノタイプと関連づけた分析もプロジェクトの終盤で試みられるようになったが、関連研究と比較して現状ではまだ不十分である。全般的に当初の研究開発目標はほぼ達成できたと高く評価できるが、研究の発展により得られた新しい知見を反映して、目標に沿って研究内容をより発展させるという面に関しては、充分であったとは言えない。④のソフトセンサに関しては、数理統計学や機械学習の最近の成果をより積極的に取り込むことによって、更なる発展の余地がある。

成果の一部、特に④のソフトセンサに関しては企業における実用化が進められている。①、②、③の技術の研究は優れた基礎研究であり、実応用への可能性が期待できるが、産業界と連携した取り組みはまだ充分とは言えない。①と②により、病気の原因タンパク質とドッキングする可能性のある候補化合物を大規模ライブラリから網羅的に高速に求めることが可能となり、今後の計算機支援創薬の研究開発の進むべき方向に変革をもたらした。一方、創薬への実応用には、今後の課題も多く残されている。