

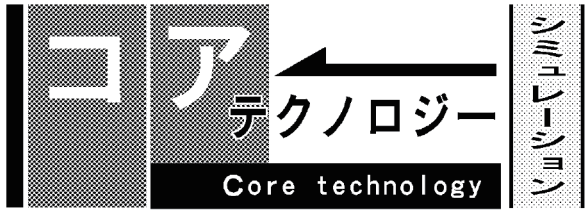
リーシユマニア症、シャーガス病、アフリカ睡眠病。これらは劣悪な衛生環境が原因で発生する難病だ。流行地域が発展途上国に偏っており、日米欧を主要事業地域としてきた製薬企業は治療薬開発が遅れた。このため「顧みられない熱帯病（NTDs）」と総称され、制圧が望まれてきた。新薬探索期間を短縮して早期の製品投入にこぎつけるため、スーパーコンピュータ（スパコン）を活用した研究が進められている。アステラス製薬と東京工業大学の協業もそのひとつだ。

ロボットに課題

そもそも新薬開発は、どのような疾患領域であれ困難を伴う。日本製薬工業協会によると、基礎

中でどういう反応があるかを調べる。これを自動的に行うので効率は良いが、当然ながら化合物の倉庫やロボットといった初期投資がかかる。「正

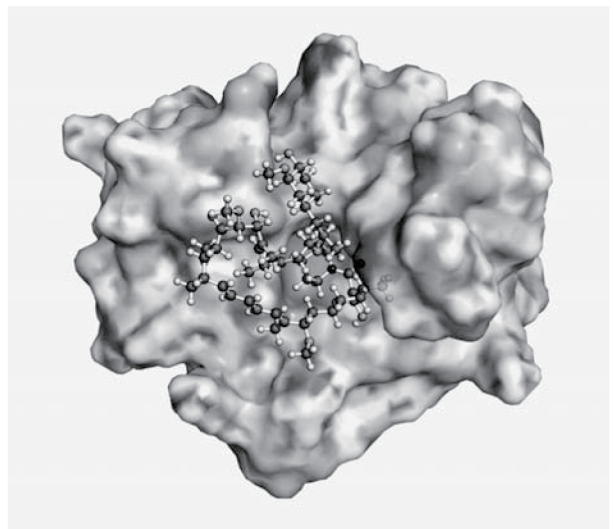
研究段階で合成された化合物が最終的に承認へ至る確率は3万分の1程度だという。そこで各製薬企業が一般的に行っている新薬候補物質の探索手法が、ハイスループットスクリーニング（HTS）と呼ばれるものだ。HTSではロボットの一種を使い、各社が持つ膨大な量の化合物をまとめて選別する。多数の穴を開けたプレートにそれぞれ化合物を入れ、試薬や酵素などを加えて穴



これを踏まえアステラスと東工大の共同研究では、インシリコスクリーニングと呼ぶ方法を採用している。インシリコとは「計算機（シリコンチップ）の中で」という意味。つまり、スパコンなどを使って新薬候補物質を探索することを指す。共同研究では東工大のスパコン「TSUBAME 2.5」が活用された。

熱帯難病の新薬探索

ドッキングシミュレーションで化合物とたんばく質の結合状態を予測する（東京工業大学関嶋研究室提供）



新薬候補物質探索の従来手法であるHTSには課題も指摘されている（ロボットによる化合物の運搬、アステラス製薬提供）



アステラス 作業期間半分以下に

シミュレーションという。この結果は化合物と作業が行われる。どの化合物が、どんなたんばく質とどのように結合するのかが予測される。人の細胞は多様なたんばく質を持っており、化合物はそのいずれかに結合して作用を示す。つまり、たんばく質が鍵穴であり、化合物が鍵と言え

る。この結果は化合物とたんばく質の結晶構造と計算機の資源を多く要するが、「TSUBAME 2.5」が活用することで、静止画ではできない予測が可能になった（同）。新美主管研究員によると、HTSの実施時に鍵穴と鍵が合う確率は0.1〜0.5%が相場。だ

め、動きを再現すること求められる。それには計算機の資源を多く要するが、「TSUBAME 2.5」が活用することで、静止画ではできない予測が可能になった（同）。東工大側も共同研究に手応えを得た。同大の関嶋政和学術国際情報センター准教授はアステラス

深い次元で協業

がインシリコスクリーニングを使った場合、10%は期待できるとい