

2015年12月9日

報道関係各位

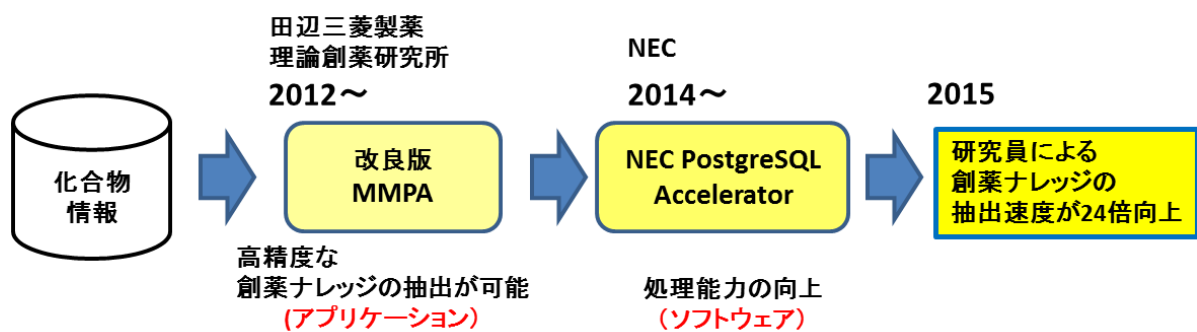
田辺三菱製薬株式会社
日本電気株式会社
株式会社理論創薬研究所

田辺三菱製薬、NEC、理論創薬研究所の3社共同で インシリコ創薬での高精度かつ高速なアプローチを開発

田辺三菱製薬株式会社（本社：大阪市、代表取締役社長：三津家正之、以下「田辺三菱製薬」）と日本電気株式会社（本社：東京都港区、代表取締役執行役員社長：遠藤信博、以下「NEC」）、ならびに株式会社理論創薬研究所（本社：横浜市、代表取締役社長：吉森篤史、以下「理論創薬研究所」）は、3社共同でインシリコ創薬*1の高精度かつ高速なアプローチを開発しました。

田辺三菱製薬と理論創薬研究所は、2012年より、膨大な化合物情報が一元化されたデータベースから、医薬品創製で重要な、目的解決に直接役立つ過去の成功・失敗事例といった「創薬ナレッジ*2」を、研究員が目的に応じて効率的に抽出できるシステムを研究・構築してきました。本システムは「Matched Molecular Pair Analysis (MMPA)」と呼ばれる解析手法の改良版をシステム化したものです（以下「改良版MMPA*3」）。これにより、非常に高精度な創薬ナレッジの抽出を可能にします。

2014年からNECも参画し、より高速度での処理を実現させるため、改良版MMPAにおけるデータ検索の過程を見直し、オープンソースのデータベース「PostgreSQL*4」に検索を並列処理させるソフトウェア「NEC PostgreSQL Accelerator*5」を適用させることで、改良版MMPAを用いた創薬ナレッジの抽出速度を最大で約24倍向上させました。



これら、「改良版MMPA」と「NEC PostgreSQL Accelerator」を効果的に用いたICTによるインシリコ創薬で、医薬候補品の選択を効率化させることが可能になると考えています。

本件に関するお問合せ先		
田辺三菱製薬株式会社 広報部 TEL：06-6205-5211（本社） TEL：03-6748-7664（東京本社）	日本電気株式会社 コーポレートコミュニケーション部 TEL：03-3798-6511	株式会社理論創薬研究所 TEL：045-342-4978

<参考資料>

1. インシリコ(in silico) 創薬

インシリコ創薬とは、ICT を駆使することで、過去の膨大な実験情報を基に、効率的かつ理論的に最善の医薬候補品を、コンピュータ上で導き出す創薬技術です。実験データを収集解析し、シミュレーションモデルを構築します。インシリコ創薬により、実際に合成する化合物数を減らすことで、従来以上の創薬スピードの向上が期待されています。

コンピュータ上での化合物構造検索のイメージ
理論創薬研究所 提供

No.	Cpt ID	MolFormula	MolWeight	ClogP	TPSA	SourceName	SourceID
No.1	285749	CB1700	124.139	2.10732	17.87	Virtual	VC-00279238
No.2	140348	CB1692	125.102	1.4714	43.26	Virtual	VC-00142965
No.3	285750	CB1690	125.102	1.4714	43.26	Virtual	VC-00279238
No.4	323258	CB1690	125.102	1.4714	43.26	Virtual	VC-00232628
No.5	278778	CB1632	126.12	1.5948	37.3	Virtual	VC-00279238
No.6	206751	CB1632	126.12	1.5948	37.3	Virtual	VC-00279237
No.7	285747	CB1770	128.141	2.0283	17.87	Virtual	VC-00279233
No.8	18178	CB1770	140.161	1.70288	40.87	Virtual	VC-00181888
No.9	102864	CB1625	142.205	2.4516	17.87	Virtual	VC-00130266
No.10	65791	CB1625	142.205	2.5004	17.87	Virtual	VC-00898682
No.11	237952	CB1625	142.205	2.5004	17.87	Virtual	VC-00230272
No.12	114178	CB1625	142.205	2.5004	17.87	Virtual	VC-00114324

2. 創薬ナレッジ (ナレッジ: knowledge)

創薬研究に携わる研究員は、自らの経験や経験豊富な研究員からのアドバイス、あるいは社内データベースの情報を基に、さまざまな医薬品候補化合物をデザインし、薬効・安全性評価を行っています。そういった単なる情報やデータに留まらない実践的な経験・ノウハウを、創薬ナレッジと呼んでいます。

3. 改良版 MMPA

田辺三菱製薬と理論創薬研究所が構築した分子データ解析システム。Matched Molecular Pair Analysis (MMPA)と呼ばれる異なる分子構造を比較して解析する手法の改良版をシステム化した。

解析対象となる化合物の構造を変化させる事で生じた様々な分子レベルでの性質の変化(水溶性、脂溶性、溶解度など)を数値化する事で、化合物のデザインの指針となる創薬ナレッジを、コンピュータ上で抽出する事が可能となる。

4. PostgreSQL

最も広く利用されているオープンソースのリレーショナルデータベースの一つ。豊富な機能と拡張性、SQL 標準への準拠を特徴とする。NEC を含む多くの個人・企業が参加するコミュニティによって開発・改善が行われている。

5. NEC PostgreSQL Accelerator

データベースである PostgreSQL の拡張機能であり、データベースの検索を GPU (画像処理向けプロセッサ) で処理させることを可能にし、専用サーバを用いることなく、検索速度の向上を実現する NEC が開発したオープンソースソフトウェア。

<会社概要>

田辺三菱製薬株式会社 (Mitsubishi Tanabe Pharma Corporation)

本社：大阪市中央区道修町3-2-10

資本金：500億円

設立：1933年12月（合併期日2007年10月）

概要：医療用医薬品を中心とする研究開発および製造・販売。自己免疫疾患、糖尿病・腎疾患、中枢神経系疾患、ワクチンなど、特徴ある医療用医薬品を提供するとともに、ジェネリック医薬品や一般用医薬品の販売を通じて、幅広い医療ニーズに対応しています。

<http://www.mt-pharma.co.jp/>

日本電気株式会社 (NEC Corporation)

本社：東京都港区芝5-7-1

資本金：3,972億円（2015年3月末現在）

設立：1899年7月

概要：パブリック事業、エンタープライズ事業、テレコムキャリア事業、システムプラットフォーム事業、その他（スマートエネルギー事業など）。

<http://jpn.nec.com/>

株式会社理論創薬研究所 (Institute for Theoretical Medicine, Inc.)

本社：横浜市緑区長津田町4259-3 東工大横浜ベンチャープラザ W101

資本金：1200万円

設立：2004年2月

概要：インシリコ創薬を専門とするベンチャー企業。コンピュータシミュレーション技術を用いた、新しい創薬理論に基づくソフトウェアの開発を通じて、医薬品リード化合物の研究開発を行います。

<http://www.itmol.com/>

以上