

製薬企業の創薬分子設計戦略とビッグデータの利用

Strategic applications of “Big data” mining to drug design in pharmaceutical companies

開催趣旨:

近年、ビッグデータの活用が医療分野の大きなトピックとなっており、米国では、オバマ大統領が Precision Medicine Initiative を展開することを発表し、個別化医療のみならず、医療と臨床の現場からのアイデアを得て創薬につながるサイクル全体を包括する概念に広がりつつある。一方、創薬研究、特に低分子のヒット探索からリード最適化までの過程においても、公共データの増大と社内データの充実により、従来の個人の経験と勘に頼る分子設計から、様々なレベルの信頼性を持つ情報を引き出しつつ、上手に設計に活用する動きが見られる。

このセッションでは、規模や方向性の違う製薬企業で、ビッグデータを創薬分子設計にどのように使うべきか、それに貢献するためにアカデミアがどのような研究をしていくべきか議論する。3-4人に、数枚程度話題提供してもらい、議論をメインに行う。可能であれば、その場でアンケートに手をあげてもらい、集計して今後のこの分野の研究についての提言のような形にできればと考えている。

モデレーター: 本間 光貴 Teruki Honma

理化学研究所 ライフサイエンス技術基盤研究センター

Center for Life Science Technologies, RIKEN

1. 大規模構造活性相関データベースを活用した医薬分子設計: マルチソースデータを如何に活用するか?

Drug Design with Gigantic SAR Databases: How do we apply multi-source data?

石原 司 Tsukasa Ishihara

アステラス製薬株式会社 Astellas Pharma Inc.

近年における公共大規模 SAR データベースの充実は、機械学習による QSAR モデル構築や MMP 解析など、低分子創薬研究におけるヒット探索やリード最適化のみならず化合物ライブラリ設計など多岐にわたる実践応用を実現せしめている。

本会では、マルチソースな構造活性相関データベースを、より信頼性あるいは精度高く利用する方法について議論を深めたい。

2. 公共データを活用した ADME 予測モデルの構築

Construction of ADME prediction models using public data

佐々木 俊太 Shunta Sasaki

帝人ファーマ株式会社 Teijin pharma

リード最適化段階での薬理活性と ADME 特性両立の困難さから、Hit 探索、HtoL 段階から ADME 問題に取り組むことが重要である。膜透過性や溶解度予測に関しては既存ソフトウェアが存在するが、化合物シリーズによっては予測が外れることがあり、ケミストにとって利用し難い現状がある。予測精度が低くなる原因の一つに予測に利用している化合物のケミカルスペースと予測対象である自社化合物のケミカルスペースが異なること、二つ目に施設、測定条件など評価法が異なるため評価値としての扱いが難しい点が考えられる。本セッションでは in-house の ADME data を使った膜透過性予測モデル及び、public な ADME data を融合した場合の膜透過性予測モデル構築の取り組みについて発表を行う。

3. Matched Molecular Pair (MMP)解析と活用場面について

MMP analysis and its applications

橋本 憲明 Noriaki Hashimoto

杏林製薬株式会社 Kyorin Pharmaceutical Co., Ltd.

最近、MMP 解析は文献や学会等で多数報告があり、簡便に化合物データからペアデータを取り出すことができるようになった。メディシナルケミストのドラッグデザインに役立ててもらえるような利用場面、活用法について議論したい。