



関嶋研究室

AI、MR、スーパーコンピュータによる 効率的な創薬の実現

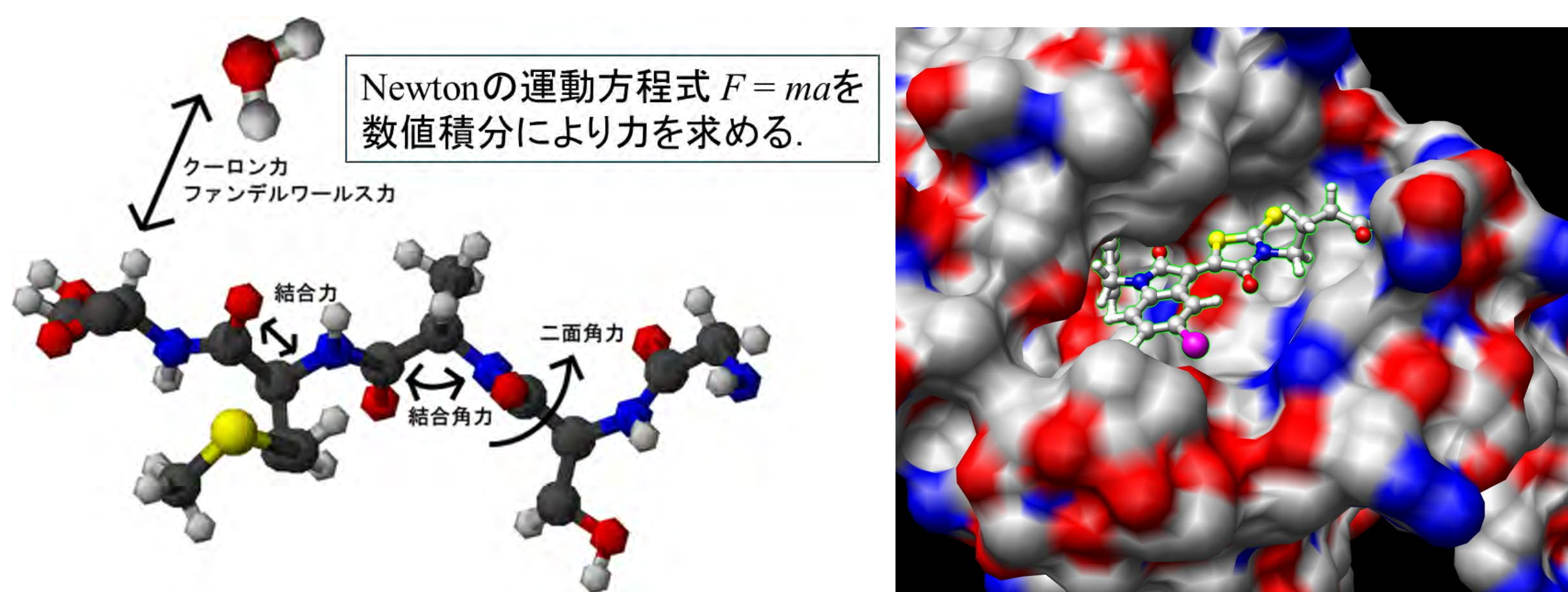
スマート創薬研究ユニット

<http://www.cbi.c.titech.ac.jp>

大規模計算によるシミュレーション

関嶋研で行っているシミュレーションは主に**分子動力学シミュレーション**と**ドッキングシミュレーション**です。

分子動力学シミュレーションは運動方程式を解いていくことによりタンパク質の各原子の位置や速度の時間変化を見る手法、ドッキングシミュレーションはタンパク質を固定し、化合物の位置や向きを最適化することで化合物の結合状態を推定する手法です。いずれも**東工大のスパコンTSUBAME3**を用いることで、他ではできない大規模な計算を行っています。



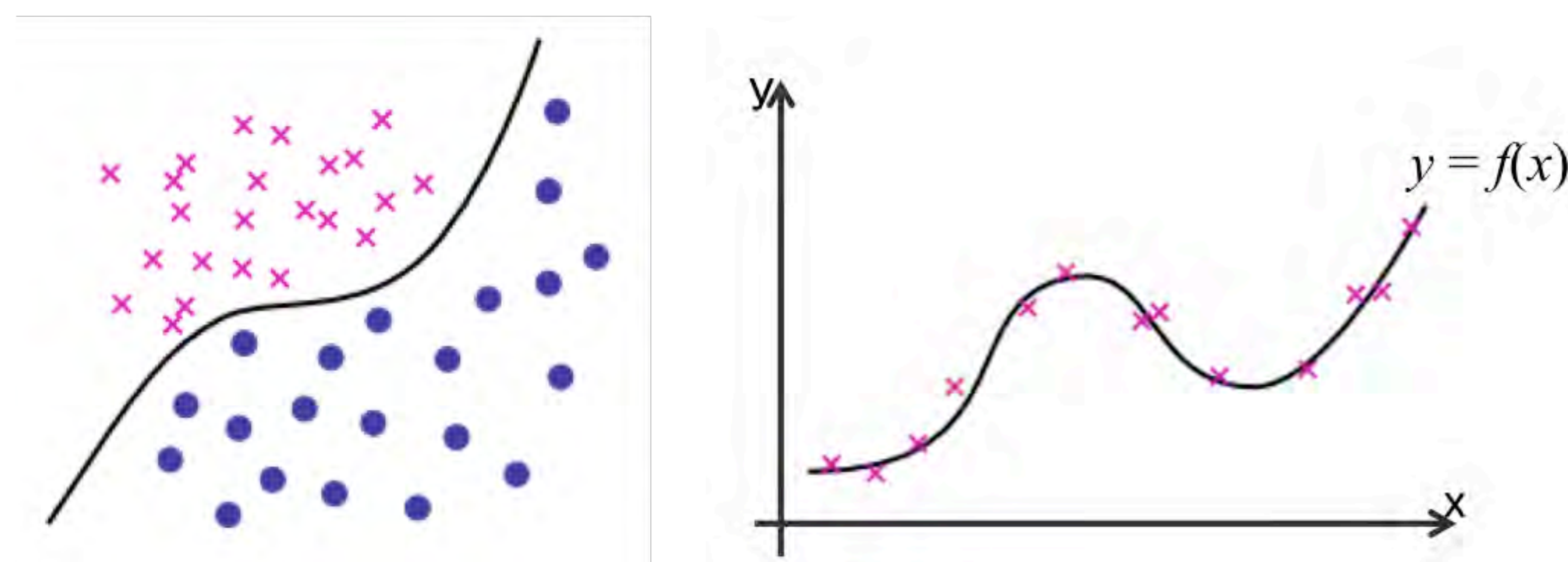
分子動力学シミュレーション

ドッキングシミュレーション

機械学習とその応用

機械学習は、過去の経験を基に将来の事象を予測する際に使われる統計手法や、予測のアルゴリズムのことを指します。機械学習の問題は大きく分類問題と回帰問題に分けられます。それぞれ予測対象が離散的な場合と連続的な場合で、使われるアルゴリズムが異なります。

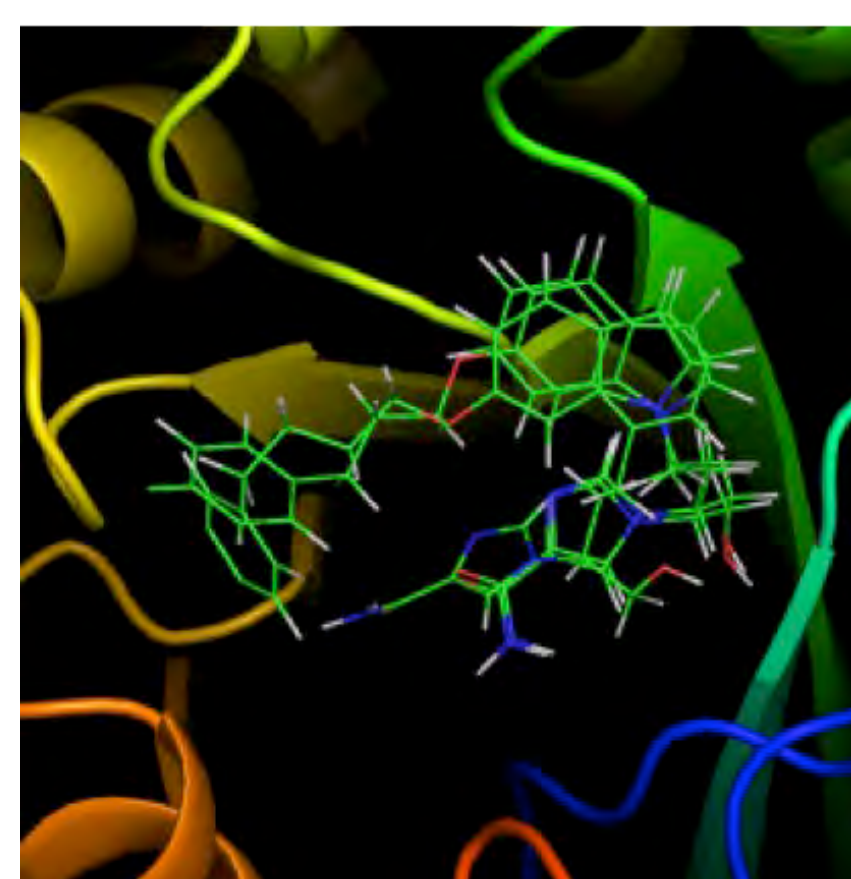
関嶋研では、公開されているデータベースの情報や製薬会社内に眠る過去の実験データを効果的に用いて創薬を効率化するため、機械学習を応用した手法を開発しています。



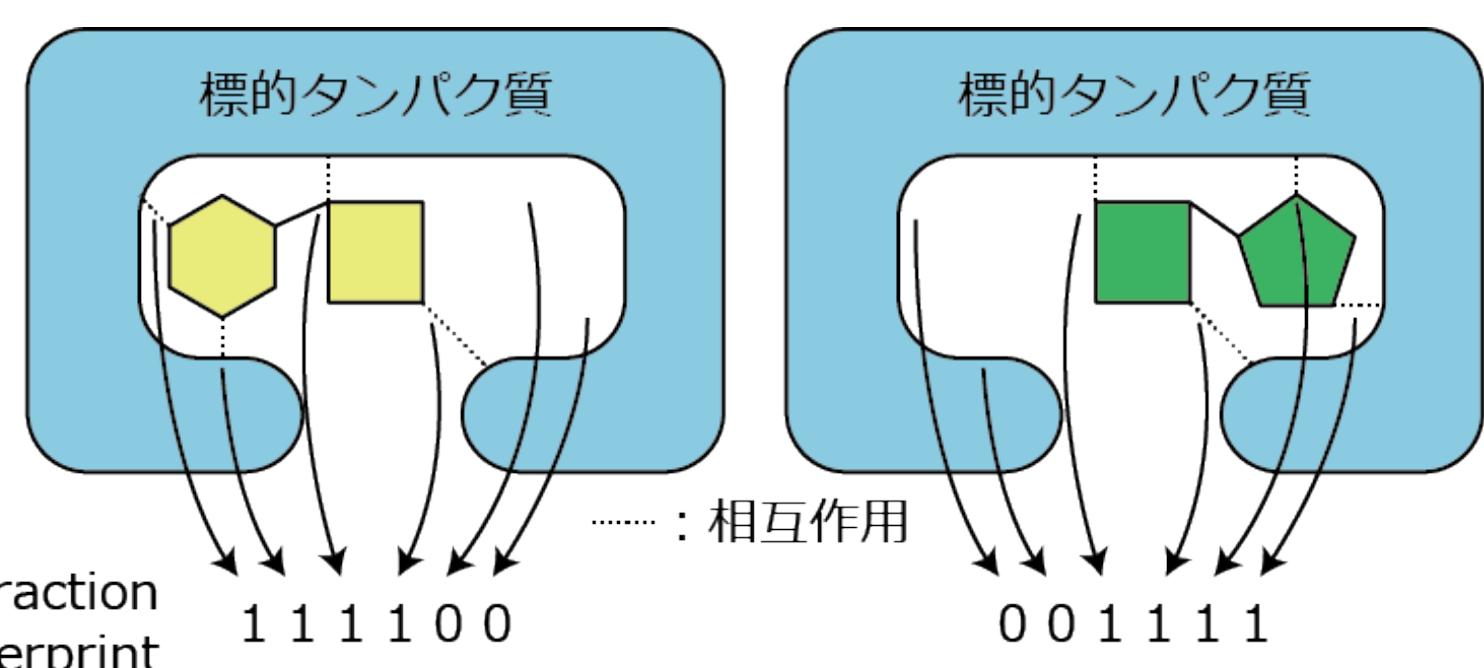
分類問題 (左) と回帰問題 (右)

新規化合物を発見する創薬研究

関嶋研では、東工大のスーパーコンピュータTSUBAME2.5による大規模計算を活用し、製薬会社などと共同で Dengue 熱などの「**顧みられない熱帯病**」の標的タンパク質について、約500万化合物の中から効果のある化合物を探す**バーチャルスクリーニング**を行いました。また、薬候補化合物を効率よく発見する手法として、タンパク質と化合物の**相互作用**を学習して**精度良く化合物を選別する手法**の開発も行っています。



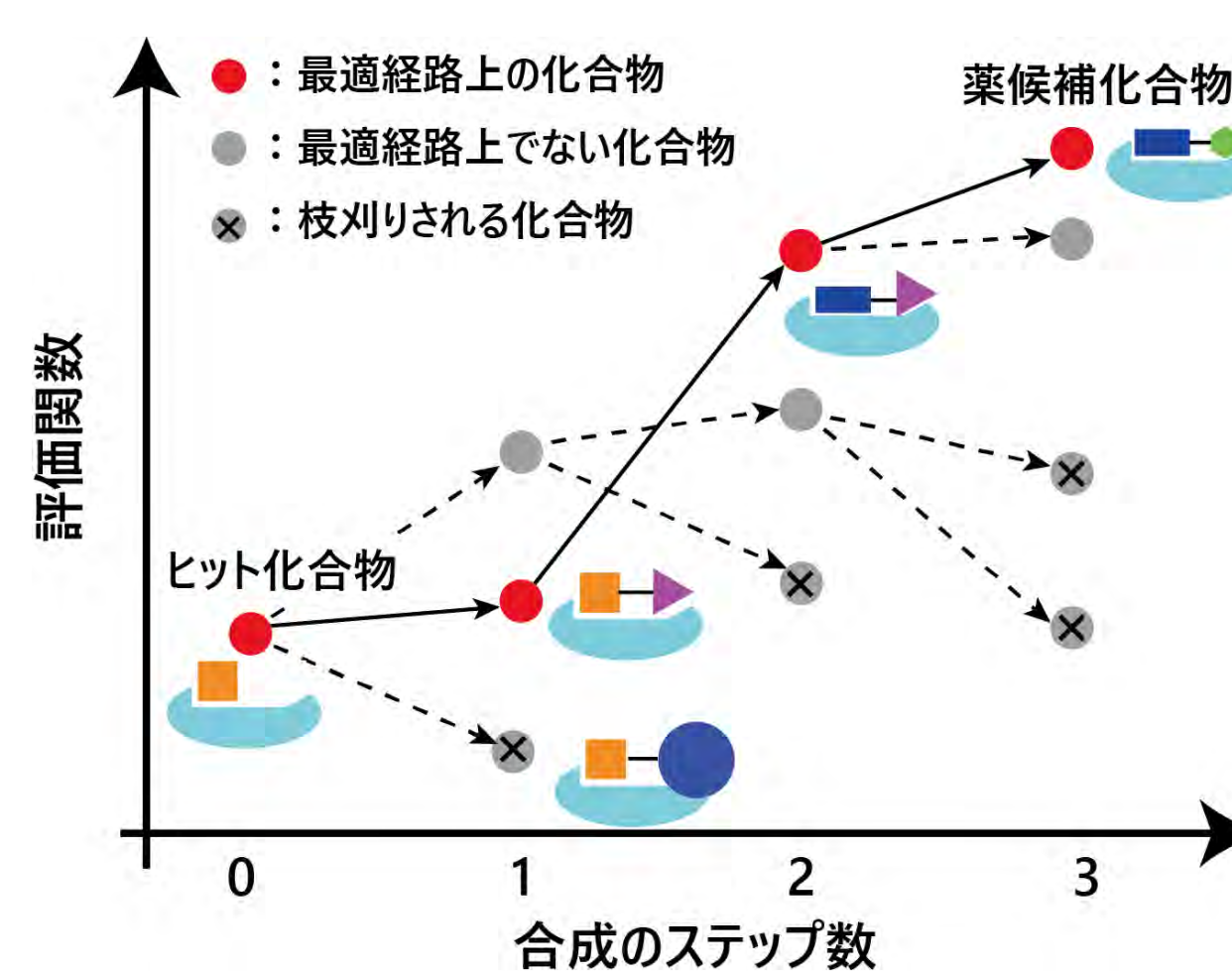
ドッキングによる
バーチャルスクリーニング



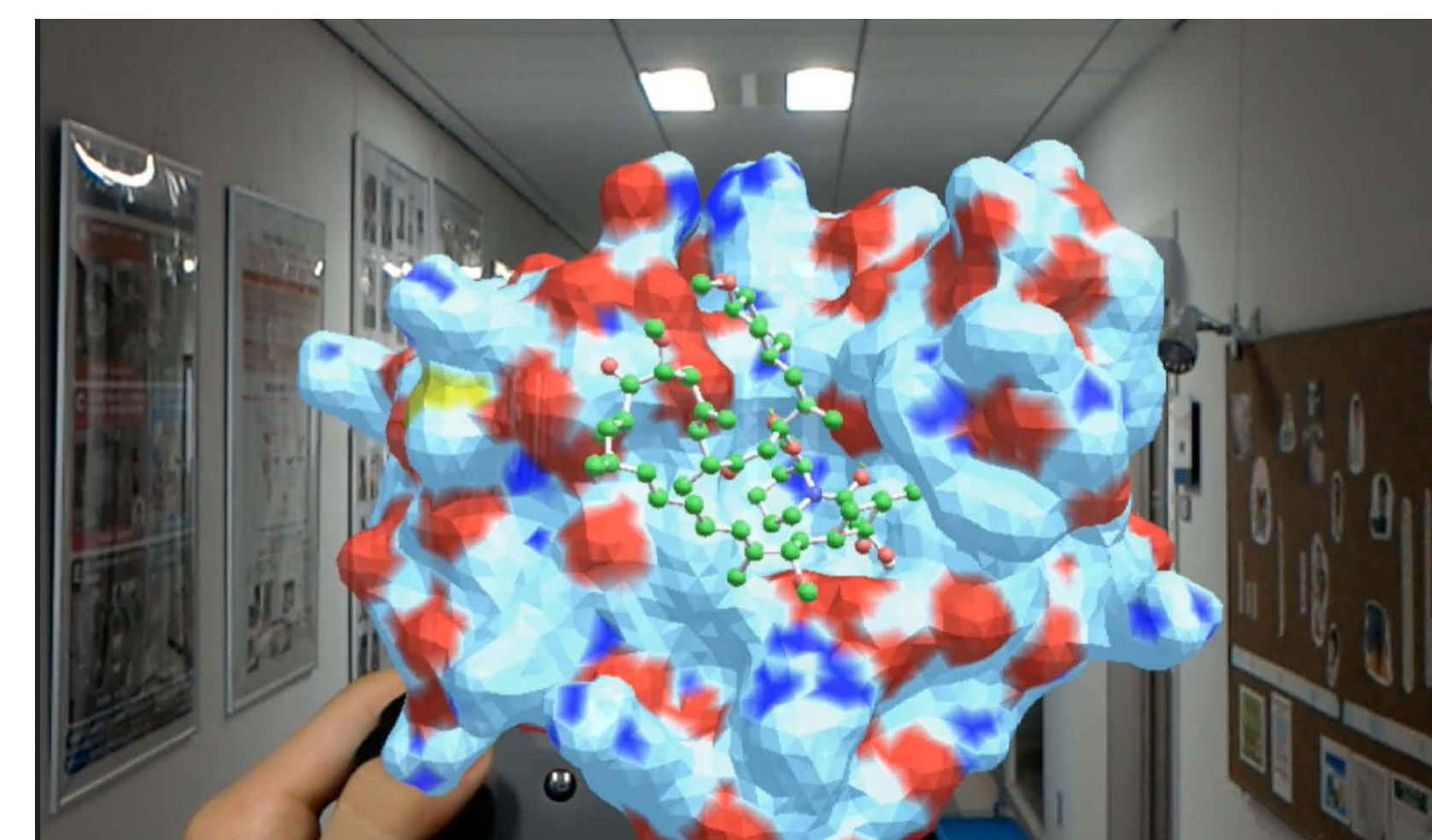
相互作用を学習して
新規化合物を発見する

創薬支援システムの開発研究

また、関嶋研では直接新たな化合物を見つけ出すことをねらう研究以外にも、製薬会社内における過去の化合物最適化データを用いて**新規化合物を最適化する経路を探索**する研究、**Mixed Reality (MR)**を用いてタンパク質と化合物を可視化し、製薬会社における遠隔会議を支援するシステムの研究など、創薬を加速する**創薬支援システム**についての研究も行っています。



過去の知見を基に
化合物を自動的に最適化



タンパク質の可視化