

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）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

創薬における候補化合物の発見とその合成反応の精査・スクリーニング、さらには製造過程の最適な監視・制御までを、ビッグデータを用いた機械学習により、革新的に統合支援することを目指したプロジェクトで、CREST期間中に達成した各要素技術を一層精緻化すると共にスケールアップを達成しつつ高速化し、統合プラットフォームに関してもCREST期間中に達成した基礎的な統合機能を拡張して実用に向けた統合プラットフォームのシステム・アーキテクチャを明らかにした。具体的には、①候補化合物の探索空間を仮想化合物ライブラリを著しく拡大することで達成し、ライブラリ全体やライブラリの一部の比較を行うための可視化技術をグラフ畳み込みニューラルネットワークを用いた深層学習により実現し、毒性化合物の判定に関する基礎的成果を得た。②疾患原因となるタンパクと化合物のドッキング可能性に関しては、深層学習による候補化合物の一次スクリーニングを高速化し、ドッキングの多重可能性も考慮した手法を確立した。③さらに、遷移状態データベースを利用した第一原理計算により、合成反応経路のより精緻な検証により合成可能な妥当な候補化合物の2次スクリーニングを一層精緻化した。④この合成反応の精緻な2次スクリーニングにより、候補化合物の合成に関して、使用溶媒や副反応の許容範囲、合成原料の溶解性などの物性に関する要求事項が得られ、これらは仮想ライブラリ探索の条件となったり、反応経路評価の際の条件となったりする。このような各機能の連携が取り扱い易いように連携実証プラットフォームのシステム・アーキテクチャが構築された。

このように、CRESTの成果を一層精緻化しスケールアップすると共に、探索、スクリーニング、検証、製造プロセスの相互の連携と統合のシステム・アーキテクチャを構築し、研究室レベルの研究から、本格的実用化開発への技術移転が可能な成果を達成したことは、高く評価したい。

1年追加期間の研究成果は、期間が短いこともあるが、査読に時間を要する学術論文に関してはCREST期間中の投稿が可能なので、やや不足していると思われる。特許も期間中の申請がない点は残念である。