

2013年3月21日

国立大学法人東京工業大学  
アステラス製薬株式会社

## 東京工業大学とアステラス製薬：「顧みられない熱帯病」の 抗 Dengue ウイルス薬の探索で共同研究開始

- 東工大のスーパーコンピュータ「TSUBAME2.0」を活用した IT 創薬 -

国立大学法人東京工業大学（所在地：東京、学長：三島 良直、以下「東工大」）とアステラス製薬株式会社（本社：東京、社長：畑中 好彦、以下「アステラス製薬」）は本日、東工大のスーパーコンピュータ「TSUBAME2.0」を活用した「顧みられない熱帯病（Neglected Tropical Diseases）、以下「NTDs」<sup>(1)</sup>の治療のための抗 Dengue ウイルス薬候補の効率的探索を目的とした共同研究契約を締結しましたので、お知らせします。

NTDs は、主に発展途上国の熱帯地域において、貧困層を中心に蔓延している寄生虫や細菌ウイルスによる感染症です。世界で 10 億人以上が感染していると言われ、地球規模での保健医療問題として国の枠組みを超えた取り組みが行われています。NTDs の中でも、Dengue ウイルスにより引き起こされる Dengue 熱/Dengue 出血熱<sup>(2)</sup>は、未だ既存の治療薬や開発品が存在しないこと、また複数のワクチンは開発中ですが、その有効性が現時点では明確ではないことなどから、アンメットメディカルニーズ（まだ有効な治療法がない医療ニーズ）の高い疾患です。

本契約の下、最先端の計算技術をもつ東工大とアステラス製薬は共同で、Dengue 熱/Dengue 出血熱に対する治療薬創出に向けた IT 創薬研究を実施します。本研究は、バイオインフォマティクス<sup>(3)</sup>の分野で豊富な研究実績を有する東工大 大学院情報理工学研究所 計算工学の秋山 泰 教授、及び計算化学の分野で豊富な研究実績を有する東工大 学術国際情報センターの関嶋 政和 准教授を中心としたグループとの共同で実施されます。

研究は大きく二段階に分けて進めます。第一段階では、特許や文献等の公開情報に対するデータマイニング<sup>(4)</sup>を実施し、抗 Dengue ウイルス薬の標的分子探索に関する有用な知識を取り出します。第二段階では、インシリコスクリーニング<sup>(5)</sup>を用いて、抗 Dengue ウイルス活性を有する可能性のある化合物を探索します。東工大は日本初のペタフロップス級の性能を誇るスーパーコンピュータ「TSUBAME2.0」を活用したデータマイニング及び市販化合物を対象としたインシリコスクリーニング計算を担当します。アステラス製薬はデータマイニングに必要なデータ収集及びインシリコスクリーニング計算結果に基づくヒット化合物の選択・リスト化を担当し、短期間かつ効率的な創薬研究を実施します。

東工大とアステラス製薬は、世界で Dengue 熱/Dengue 出血熱により苦しむ患者さんのために早期に治療薬が生み出されるように、本共同研究を通じた取り組みでグローバル規模の保健医療問題の改善に寄与します。

なお、東工大とアステラス製薬は、NTDs の治療のための抗寄生原虫薬探索に関する共同研究契約を 2012 年 7 月 30 日に締結しています。

以上

## 東京工業大学

創立 130 年を越える歴史を持つわが国最大の理工系総合大学です。創造性豊かな教育によって日本の産業を支える優れた理工系人材を輩出してきました。3つの学部（理学、工学、生命理工学）、6つの大学院研究科（理工学、生命理工学、総合理工学、情報理工学、社会理工学、イノベーションマネジメント）、5つの研究所を有します。東京工業大学の詳細な情報については、本学ホームページをご覧ください。

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

## アステラス製薬

先端・信頼の医薬で世界の人々の健康に貢献することを企業理念に掲げています。世界で約 1 万 7 千名の従業員を有しています。泌尿器疾患、免疫疾患（移植を含む）及び感染症、がん、精神・神経疾患、糖尿病合併症及び腎疾患の領域におけるグローバル・カテゴリー・リーダーを目指していきます。アステラス製薬の詳細な情報については、当社ホームページをご覧ください。

<http://www.astellas.com/jp>

アステラス製薬は、パートナーシップの取り組みを通じて、発展途上国における“保健医療へのアクセス問題（Access to Health<sup>\*</sup>）”の改善に取り組んでいます。Access to Health への貢献の一環として、アステラス製薬は、自社の研究ノウハウやアセットを活用して、世界で NTDs に感染し苦しむ患者さんのための新薬を生み出すための取り組みを行っています。

\*：世界には未だアンメットメディカルニーズの高い疾患・病気が数多く存在します。また、貧困や医療システムの不備から、必要な医療を受ける事ができず、医薬品を入手できない多くの人々がいます。これをアステラス製薬では、「保健医療へのアクセス問題」（Access to Health）と捉え、企業市民の一員としてその問題解決へ向け取り組んでいます

## スーパーコンピュータ「TSUBAME2.0」

TSUBAME2.0 は、産業界のパートナー（日本電気株式会社、日本ヒューレット・パッカード株式会社、米国 NVIDIA 社、マイクロソフト株式会社等）の協力の下、東工大学術国際情報センターにより運営されるスパコンです。2010 年秋、TSUBAME2.0 は GPU による高速化により、2.4 ペタフロップスを達成し、世界で最も高速で、省エネのスパコンの一つです。TSUBAME2.0 の登場により、科学者は今までと比べて圧倒的に高速・大規模な計算を快適に実行できるようになりました。TSUBAME2.0 は、初代 TSUBAME1.0 に続く、TSUBAME シリーズの 2 代目にあたります。TSUBAME1.0 は、ClearSpeed や NVIDIA GPU 等、様々な最先端の大規模計算の高速化技術を搭載しておりましたが、TSUBAME1.0 で得られた数多くの重要な技術的教訓は、最新の TSUBAME2.0 の設計・構築に重要な役割を果たしております。TSUBAME2.0 は、TSUBAME1.0 で成功したアーキテクチャーデザインを継承・発展させることで、消費電力はほとんど変わらないにもかかわらず、30 倍もの計算性能の向上に成功しました。TSUBAME2.0 の運用を開始した 2010 年 11 月にはスパコンの絶対性能ランキング (TOP500) で世界 4 位、電力性能ランキング (Green500) で世界 2 位を達成しました。

### (1) 顧みられない熱帯病 (Neglected Tropical Diseases : NTDs)

主に開発途上国の熱帯地域、貧困層を中心に蔓延している寄生虫、細菌ウイルス感染症のことで、WHO で焦点を当てている 17 の疾患群\*\*だけで、世界で 10 億人以上が感染していると言われています。未だ必要な医療を受けることができず、必要な治療薬を入手できないために、人々の生命を脅かす健康問題に留まらず、経済活動の足かせ・貧困の原因ともなっています。

\*\*： ブルーリ潰瘍、シャーガス病、囊尾虫症、デング熱/デング出血熱、ギニア虫感染症、包虫症、食物媒介吸虫類感染症、睡眠病、リーシュマニア症、ハンセン病、リンパ系フィラリア症、河盲症、狂犬病、住血吸虫症、土壌伝播寄生虫症、トラコーマ、トレポネーマ感染症

### (2) デング熱/デング出血熱

デング熱/デング出血熱は、蚊（主にネッタイシマカ *Aedes aegypti*）によって媒介されるデングウイルスの感染症です。非致死性の熱性疾患であるデング熱と、重症型のデング出血熱の 2 つの病態があります。デングウイルス感染症がみられるのは、媒介する蚊の存在する熱帯・亜熱帯地域、特に東南アジア、南アジア、中南米、カリブ海諸国ですが、アフリカ、オーストラリア、中国、台湾においても発生しています。

### (3) バイオインフォマティクス

バイオインフォマティクスとは、生物学のデータを情報科学の手法によって解析する学問及び技術です。生物情報科学と訳されます。

### (4) データマイニング

統計学、人工知能、機械学習等の技術を大量のデータに網羅的に適用することで有用な知識を取り出す技術を言います。

### (5) インシリコスクリーニング

インシリコスクリーニングは、創薬標的蛋白質の三次元構造をスーパーコンピュータ等の大型計算機で解析し、多数の化合物から活性のある化合物を選び出す技術を言います。インシリコ (*in silico*) とは、「計算機 (シリコンチップ) の中で」の意味です。

お問い合わせ先	
東京工業大学 広報センター TEL: 03-5734-2975 FAX: 03-5734-3661 Email: <a href="mailto:kouhou@jim.titech.ac.jp">kouhou@jim.titech.ac.jp</a> HP: <a href="http://www.titech.ac.jp/">http://www.titech.ac.jp/</a>	アステラス製薬株式会社 広報部 TEL:03-3244-3201 FAX:03-5201-7473 HP: <a href="http://www.astellas.com/jp">http://www.astellas.com/jp</a>