

# 創薬ロボット工場

株式会社 インシリコデータ  
湯田 浩太郎

## 2. 創薬ロボット工場の提案

単位反応的ロボットや全合成的ロボットは単体で動くことを想定。

創薬工場への展開



単体合成ロボット⇒多数のロボットを同時に稼働

次世代型  
化合物合成の形

# □創薬ロボット工場発想のルーツ

Craig Venter : 世界で最初に**ヒトゲノムの完全解析**を実現

\* 実質的には同時に世界で進めていた「ヒトゲノム計画」と略同時タイミングでのヒトゲノム発表となったが、Venterの方が若干早かったようである。

2007年に同研究所のグループは、ヴェンター自身の完全ゲノム配列を公開した。これはほぼ同時期に公表されたジェームズ・ワトソンのゲノムとともに、初めてのヒト個体完全ゲノム情報で、二倍体ゲノムのすべての相同遺伝子を含んでいる。

## ヒトゲノム計画 (Human genome project)

- 1990年より開始された国際プロジェクト
- 米国を中心に3000億円を投下、ヒトの標準的なゲノム配列を解読することが目標
- 2000年にヒトゲノム概要(ドラフト)の解読完了
- 2003年にヒトゲノム解読が「完了」した



<https://www.slideshare.net/YuSawai/share-31524674>

2006年、ヴェンターが設立したTIGRその他の財団は統合されてJ・クレイグ・ヴェンター研究所 (J. Craig Venter Institute) となり、彼が現会長である。

ゲノムのドラフトは2000年6月に発表されたが、その詳細な情報についてはセセラ社もHGP(ヒトゲノム計画)側も翌年2月まで公表されなかった。2001年2月に、HGP側はNature誌の特別号で<sup>11</sup>、セセラ社はScience誌で<sup>12</sup>その配列に対する分析と、そのドラフトの構築に用いた手法の詳細が発表された。

こうした解析によって、ヒトゲノム全体に含まれる遺伝子数は、2万2287個と結論づけられた。

# J. Craig Venter Institute

<https://www.jcvi.org/>

JCVI J. CRAIG VENTER INSTITUTE™

About Research Publications Donate News Careers Contact

## NO MORE NEEDLES!

Using Microbiome and Synthetic Biology Advances to Treat Type 1 Diabetes

[Learn More](#) [Donate Now](#)

### PRESS >

- 09-JUL-2019 **COLLABORATOR RELEASE**  
Combining Antibiotics, Researchers Deliver One-Two Punch against Ubiquitous Bacterium
- 17-JUN-2019 **NEWS ALERT**   
J. Craig Venter will deliver the Mendel Lecture June 18th at the European Human Genetics Conference.
- 04-JUN-2019 **COLLABORATOR RELEASE**  
Zymo Research Recognized by NASA for its Support of Research Aboard the International Space Station
- 08-APR-2019 **COLLABORATOR RELEASE**  
Oral bacteria 'battle royale' helps explain how a pathogen causes hospital infections
- 25-OCT-2018 **COLLABORATOR RELEASE**  
Rainbow Around The Son Book Chronicles a Mother's Love and the Mutant p53 Gene
- 11-OCT-2018 **COLLABORATOR RELEASE**

### SPOTLIGHT

**Scientist Spotlight: Lauren Oldfield**

Since high school, Lauren Oldfield, PhD found that science was her calling. It started with a love of reading encouraged by her mom and grandmother, both avid readers, and weekly trips to the public library. Books by Michael Crichton and Richard Preston were staples in her grandmother's collection.

[Read more](#)

**When Starved, Dangerous Oral Bacteria Hang On**

J. Craig Venter Institute (JCVI) post-doctoral fellow, Jonathon Baker, PhD and a team of researchers from JCVI, University of Washington, the University of California, Los Angeles, and The Forsyth Institute recently published their findings from the first study to examine the ecological dynamics of the oral microbiome during long-term starvation.

[Read more](#)

[Support Innovative Science](#)

# J. Craig Venter Institute (J. Craig Venter Institute)



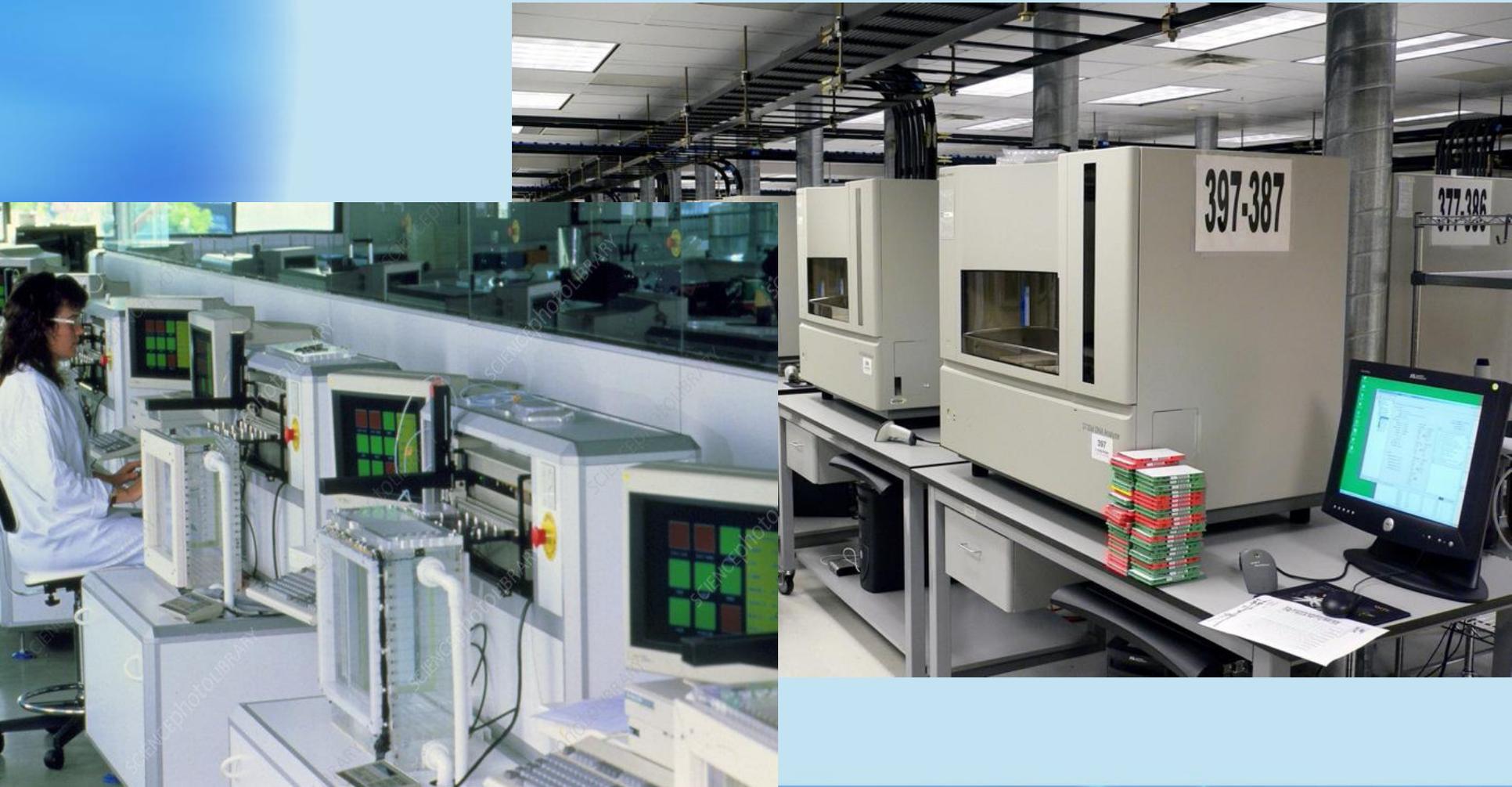
# 遺伝子解析工場（1）

## ■多数のシーケンサーを投入

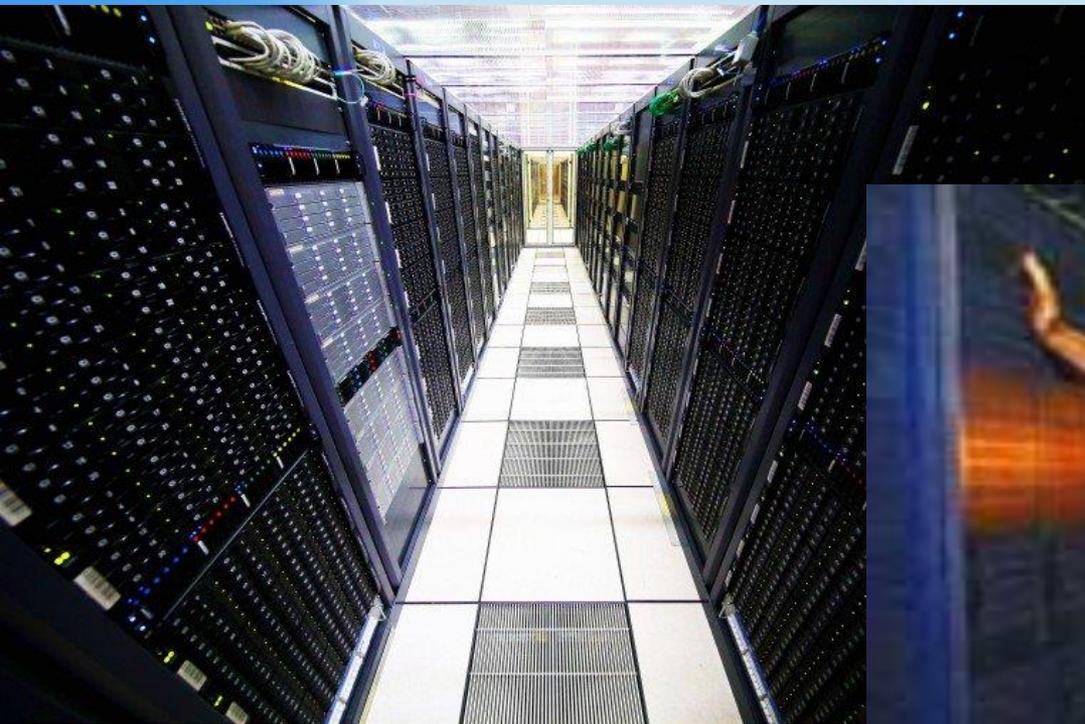


# 遺伝子解析工場（2）

■ 多数のシーケンサーを投入し、世界初の人ゲノム解析実現



# 遺伝子解析工場（コンピューター）



## 2. 創薬ロボット工場の提案

単位反応ロボットや全合成ロボットは単体で動くことを想定。

創薬工場への展開



単体合成ロボット⇒多数のロボットを同時に稼働

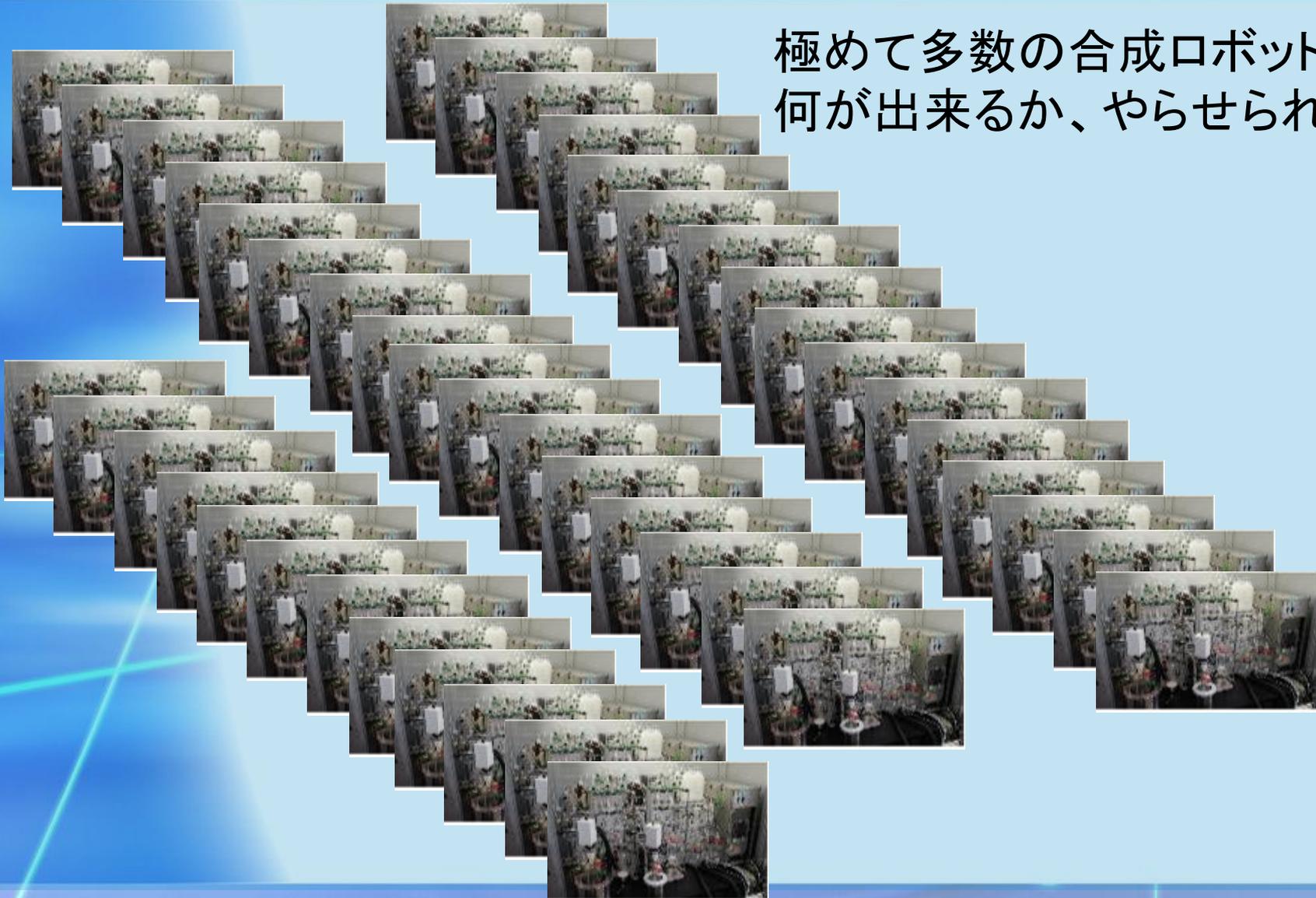
次世代型  
化合物合成の形

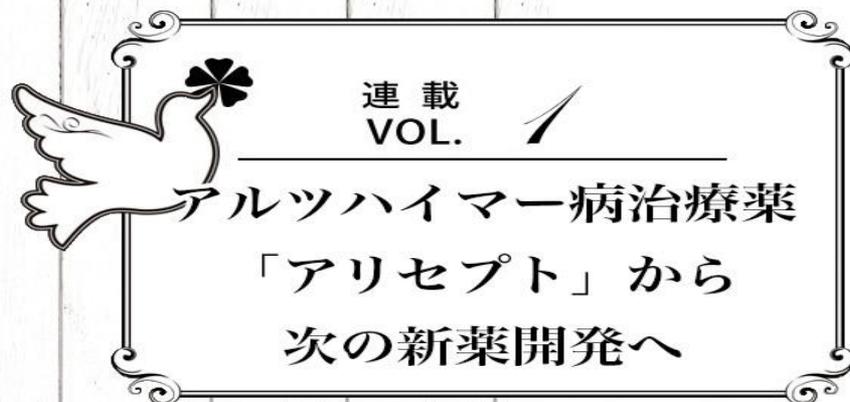
# □創薬工場ロボットの提案

## ■合成ロボットとコンピューター



極めて多数の合成ロボットで  
何が出来るか、やらせられるか





同志社大学生命医科学部 客員教授  
杉本 八郎 氏 (薬学博士)



創薬に携わる者には「ファーマドリーム」という言葉があります。医師が一生かかって治せる患者さんの数には限りがありますが、しかし、1つの新薬を開発することで数えきれない人数の患者さんを助けることができる。そういう、創薬の夢と希望...光を表す言葉です。もちろん、新薬開発の成功率はあまりにも低く、困難なことの連続ではあるのですが.....。

アリセプト開発までに15年を要したとか。1つの創薬のために1000を超える化合物を合成されたと聞いています。新薬を世に送り出すには血の滲むような努力の日々があったのですね。

## 杉本 八郎アプローチによる新薬開発

ひたすら化合物の合成を続けてアリセプトを見出した。合成化学者を数人？率いて、何年も引き続き合成させて新薬発見するコンセプトは、存在する化合物ライブラリーをスクリーニングすることに等しい。

現在のコンビナトリアルケミストリーとHTSの統合、仮想化合物とインシリコスクリーニングの統合等のアプローチに等しい。

合成化学者を何人も集めて、何年も合成続けることは現在の一般的な環境では実施困難となっている。

そこで、現在の技術を駆使した新たなアプローチが必要と考える。

## 杉本 八郎アプローチの基本は正しい

しかし、近年の状況は多数の合成化学者を長期にわたって使い続けることはかなり厳しい状況である。

もし、合成化学者を多数雇って働かせることが出来れば、杉本アプローチを達成できる。

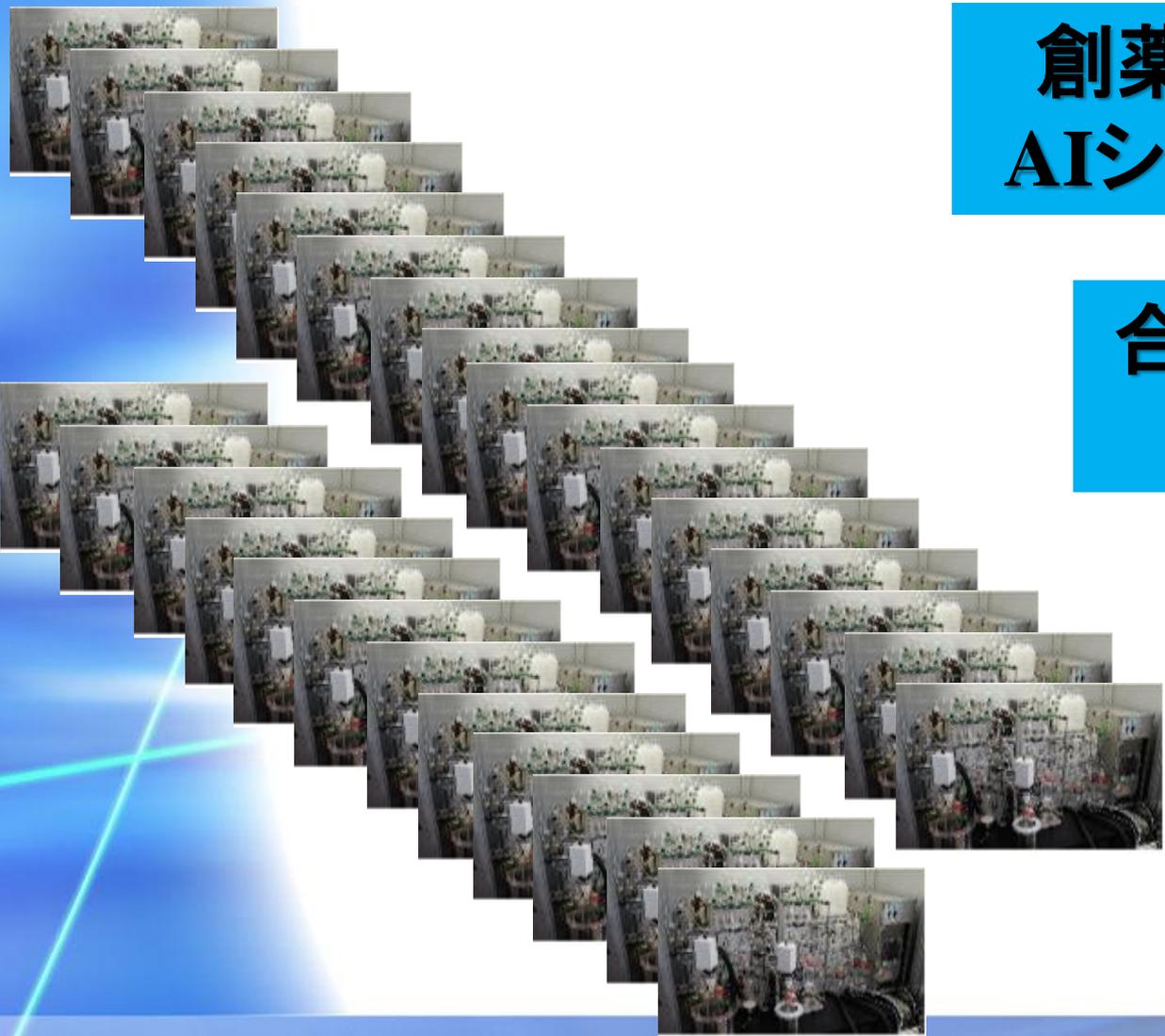
ここに、合成ロボットが活躍できる基本がある。

1. **完全合成ロボット(ロボットの数=合成研究者数)**
2. **合成研究者支援型合成ロボット**  
**合成研究者の数を実質的に増やしたことになる**

# □合成ロボットの形態

- 1. 完全合成ロボット(ロボットの数=合成研究者数)**  
実現には時間がかかる
- 2. 合成研究者支援型合成ロボット**  
合成研究者の数を実質的に増やしたことになる  
様々なレベルのロボットを開発する(合成化学者の支援)
- 3. 合成ロボットを意識したインシリコシステムの構築**
  - ・ターゲット化合物の創出
  - ・多種の合成ロボットを使い分けて合成するルート構築  
総ての合成反応を意識するLHASA型と異なり、  
合成ロボットの機能を最大限化するルートを創出

# □創薬から合成、HTS実施までの統合型AIシステム



創薬支援  
AIシステム

合成ルート支援  
AIシステム

HTS支援  
AIシステム

# 新たな未来システムの提案

## 1. 総合研究支援AIロボットの提案

専門AIシステムや関連機能／ツールを用いて、より強力／高度な機能を持つAIシステムの設計をサポートする上位のAIシステム

**総合研究支援AIロボット**⇒

専門AIシステムを複数連携し、より高度／複雑な仕事を行う**複合型AIシステム**を構築

## 2. 創薬工場ロボットの提案

現状：単位反応的ロボットや全合成ロボットは単体で動くことを想定。

**創薬工場ロボット**⇒

単位反応ロボットを多数用いて同時に稼働し、多数の化合物を大規模に合成する



ご清聴ありがとうございました

株式会社 インシリコデータ  
湯田 浩太郎