

難病を制する創薬に活用できる I科の技術についてお話ししよう

瀧 真清

先進理工学専攻（化学生命系）准教授

スイスETHチューリッヒ校 健康科学技術科 客員教授

本学での授業：生物学、生物有機化学など

研究：創薬システム作り

（ガンなどの疾患を早期に発見したり治療する技術開発）

専門：有機合成化学・進化分子工学

2018年1月9日（火） 16:30～17:30

本セミナーのtake-home message

- 教員として:「世間はデータ(をいじる)サイエンティストを生物学/創薬分野にて求めている」ということを情報系のキャリアプランの一つとして示したい。
- 研究者として:私どもがやろうとしていることに加わってくれる学生アルバイトの方を自然な流れとして募集したい。

IBM Research – Zurich > Cognitive Computing & Industry Solutions >

Computational systems biology

Developing predictive models for precision medicine

[Overview](#)[Research projects](#)[Additional resources](#)[Publications & presentations](#)[Group members](#)

スマート型診断デバイス作りが、IBMチューリッヒで最もアツい。

With the advances of high-throughput experimental techniques, biomedical research is turning into information science. This requires the use of machine and deep-learning approaches, statistics and mathematical modelling. Individual cellular processes that comprise the interplay of several molecular players, such as cell signaling, can now be quantitatively characterized to allow a systematic view of biological processes. A better understanding of biological processes is crucial in order to provide robust predictive models that improve disease prognoses and treatment strategies.

Our group is exploiting a large variety of data — multi-omics datasets, single-cell proteomics and mass spectrometry-based quantitative proteomics — to dissect the molecular mechanisms of cancer. Our goal is to develop predictive models for precision medicine.

私が本気で予想していること

- 20年後: (今で言う) 文系出身のリベラルアーツを習熟したリーダーが、情報科学を武器にして実験科学者を従えて、安価・迅速に創薬を行う時代。
- 創薬は医学者や薬学者だけが行うものではなくなる。

誰でも創薬

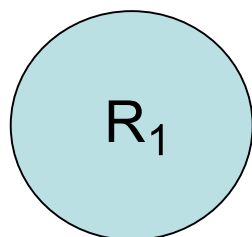
誰でも創薬

先駆け的にやりたいこと

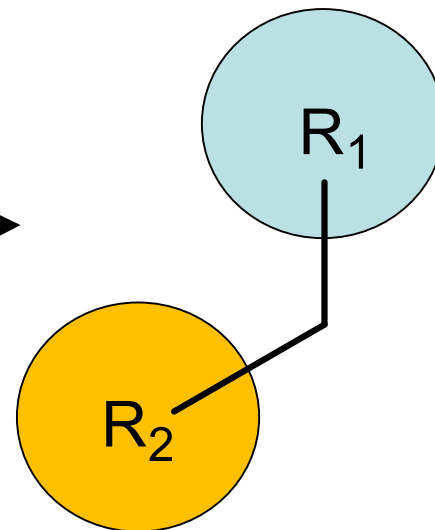
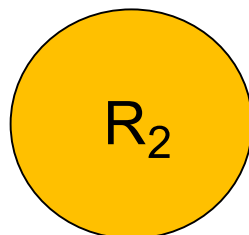
市販品
約34万種

市販品
約17万種

578億種
の可能性



+

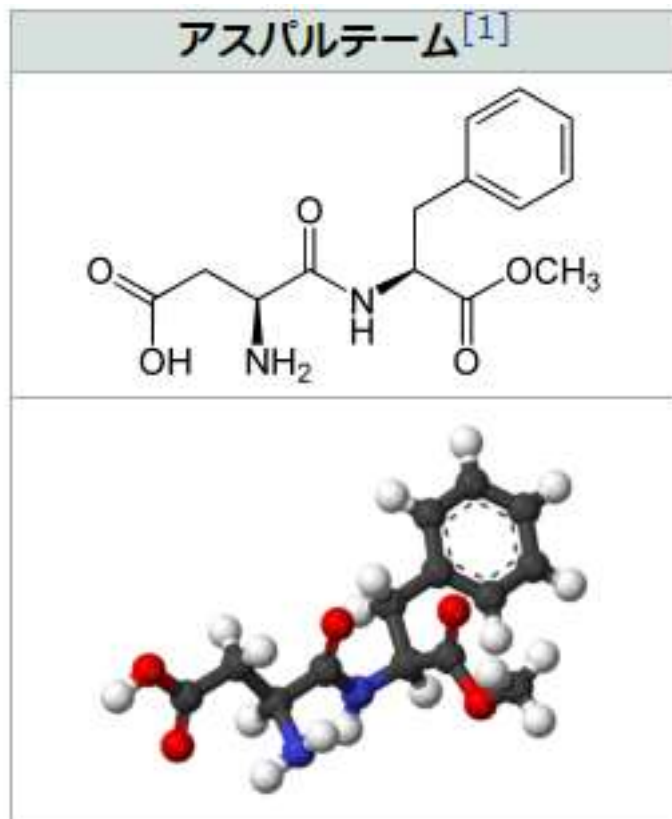


構造A

構造B

構造A-B

MOLファイル形式とは？



==

```
Chime 01080510043D
40 40 0 0
2.4000 -0.8040 2.0360 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.5080 0.3480 2.3040 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.0440 0.0840 2.0080 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.7640 0.3600 2.8800 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.1120 -1.6240 2.5520 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.6240 3.5480 -2.6880 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.3480 -0.6160 2.3200 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.5920 0.5800 3.3800 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.9680 1.6240 1.5440 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.8880 1.4640 0.0480 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.0160 1.8560 1.8000 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.3480 2.4800 1.8520 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.1240 2.1320 -0.6280 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.7080 0.5400 -0.4560 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.6360 0.4600 -1.4040 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.3360 -0.4040 0.8560 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.7520 -0.5680 0.5400 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.5160 -1.5760 1.3840 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-3.5960 -1.2480 1.8480 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.4160 2.9320 -3.9880 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.0960 -2.8280 1.6360 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.3640 -0.6400 0.1360 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.2000 0.4200 0.7480 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.0240 -0.8080 -0.9720 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.3240 0.2600 -1.8280 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-3.1080 -0.7520 -1.1680 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.6920 -1.8080 -1.2800 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.0680 2.2280 -3.3840 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.8440 1.5600 -1.8840 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.1680 -0.0400 -2.5560 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.4520 0.9320 -3.3400 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.2200 2.5400 -2.6560 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.7440 1.8080 -1.3280 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.2520 -1.0400 -2.5240 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.3400 0.6880 -3.9080 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.7400 -3.1760 1.3080 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.6320 -4.2440 1.5440 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.0360 -2.6280 1.9480 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.4800 -3.0400 0.2520 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.4600 -1.0640 1.0640 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
36 39 1 0
36 38 1 0
36 37 1 0
31 35 1 0
30 31 1 0
30 34 1 0
29 33 1 0
29 32 1 0
28 32 1 0
28 31 1 0
25 29 1 0
25 30 1 0
24 27 1 0
24 26 1 0
24 25 1 0
21 36 1 0
20 28 1 0
18 21 1 0
18 19 1 0
17 24 1 0
17 23 1 0
17 18 1 0
16 22 1 0
16 17 1 0
14 15 1 0
10 14 1 0
10 13 1 0
9 12 1 0
9 11 1 0
9 10 1 0
6 32 1 0
3 16 1 0
3 4 1 0
2 9 1 0
2 8 1 0
2 3 1 0
1 40 1 0
1 7 1 0
1 5 1 0
1 2 1 0
M END
```