

# 細胞シミュレーション コンサルティング

## 研究の加速と充実のために

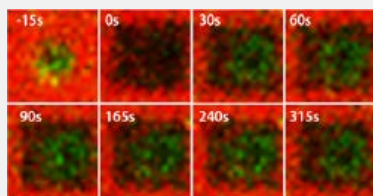
## コンサルティング

コンピュータシミュレーションによって細胞生物学や分子生物学を行おうとする試みは、少なくとも1961年にまで遡ることができます。しかし論文数の急激な増加が始まったのは2005年頃からです。今では年間3000本以上の論文が発表されており、実験との共著論文を頻繁に目にするようになりました。しかしシミュレーションを始めようすると、依然として高いハードルを感じます。シミュレーションがどう役に立つのか、どのようなソフトウェアとハードウェアが必要なのか、はじめるまでに何を学ばなければならないのか、時間と努力に見合った結果が得られるのかなど、多くの疑問と不安があります。

細胞シミュレーションの最大の特徴と役割は予言にあります。実験では発見困難な新たな現象とメカニズムを抽出することができます。しかし、どのようにモデルを創るのか、なぜそのような結果になるのかを解析するためには、経験とノウハウが必要です。弊社には30年に渡る細胞シミュレーションの経験があります。私たちは上に述べたような様々な疑問にお応えし、実験の確認から予言までを見据えた細胞シミュレーションのコンサルティングを行います。

タンパク質の機能解析を行うことで、細胞における新たな現象とそのメカニズムを解明する研究が進んでいます。研究結果全体を

## 細胞生物学



俯瞰するために、タンパク質相互作用を簡略化した図を描くことも多くなりました。しかしこのような図は実験結果に基づいてはいませんが、逆に図示されたメカニズムが実験結果の要点を説明する

は、必ずしも明確ではありません。もしこれが明確になれば、実験で得られた結果をより確固としたものにすることができます。ここに細胞シミュレーションを導入する大きな意義があります。A-Cellではタンパク質相互作用を簡略化した図(ポンチ絵)を基にしてモデルを創ることができます。速度定数などのパラメータがすべて分かっている必要はありません。色々な条件でシミュレーションを行うことにより、どのような条件であれば実験結果を再現できるのかを明らかにすることができます。再現できないときには、どのようにすれば再現できるのかを推定することも可能です。細胞シミュレーションのこのような活用について、弊社の経験とノウハウをご提供致します。

新しい薬が市場に投入されるまでのコストは増加の一途を辿り、いまでは1,000億円を超えられていると言われています。様々な要因が指摘されていますが、根本的には薬効メカニズムと副作用が完全には解明されていないことにあります。しかし考えてみればこれは当然のことで、一つの薬剤を投与した時に、細胞内で生ずる広範なタンパク質の相互作用の変化を、実験ですべて調べ上げることは不可能です。しかも予想しないとは限りません。このように実験で調べ上げるのは実質的に不可能です。

## 創薬

一方、シミュレーションの最大の利点は自由にパラメータを変えられることです。つまりシミュレーションでは様々な状況を作り出すことができ、どのパラメータをどう変化させればどのような結果になるのかを解析することができます。しかもモデルに含まれるすべてのタンパク質の変化を知ることができ、その理由を知ることができます。この特徴を生かせば、効果的に副作用の少ないターゲットを見つけることが可能となるだけでなく、必要とされる薬剤の性能や副作用の予見を行うことも可能になるでしょう。



このように細胞シミュレーションは創薬にとって本来不可欠なもので、その関心が高まってきています。しかし実際に活用するためには、細胞シミュレーションに関する経験とノウハウが必要です。さらに、細胞シミュレーションを活用した創薬研究を実りあるものにするためには、実験との密なコミュニケーションが不可欠です。研究黎明期より実験との共同研究を行ってきた弊社のノウハウを生かして、細胞シミュレーションの創薬展開を、その検討段階から支援します。

細胞シミュレーションに関心があるものの、何が得られるのか、どのように導入したら良いのか、などの疑問にお答えします。企業、大学、研究機関を問わず、お気軽に当社までご連絡下さい。

株式会社 True Cell Simulations

〒107-0052

東京都港区赤坂2-16-6 BIZ MARKS赤坂

03-6868-5430

<http://tc-simulations.com/homepage/>

[contact@tc-simulations.com](mailto:contact@tc-simulations.com)