

# 日本たばこ産業株式会社医薬総合研究所 様

研究開発の効率化、迅速化に貢献、創薬を強力にバックアップする

無駄な作業がなくなり、本来、研究者がすべき思索や創造により多くの時間を割けるようになりました

川上 浩氏

日本たばこ産業株式会社医薬総合研究所  
研究企画部・グループリーダー



## 導入システム 概要

- ハードウェア PRIMERGY RX300 S8
- ソフトウェア JChemシステム（2016年8月本格稼働）  
化学物質管理システム（2017年4月本格稼働）  
電子実験ノートシステム（2016年11月本格稼働）

日本たばこ産業株式会社 (JT) は、たばこだけでなく、医薬、加工食品を事業として展開しています。医薬事業では 1993 年に大阪・高槻に設立した医薬総合研究所 (以下医総研) を中心拠点として、主に「糖・脂質代謝」、「ウイルス」、「免疫・炎症」の 3 領域で研究開発をしています。そのためには膨大な化合物の中から有望な候補化合物を探索、検証する必要があり、コンピュータシステムはそれに欠かせません。医総研の既存システムが更新期を迎えたのに際し、富士通は、より医薬開発ニーズに適合するシステムを提案、採用されました。これは医総研の研究開発能力を高め、強力に支援するツールとなりつつあります。システムの導入の経緯や利用状況について、医総研にうかがいました。

## JTにおける医薬事業

世界に通用する独創的な新薬開発をめざす



日本たばこ産業株式会社  
化学研究所  
グループリーダー  
薬学博士  
前田 公也氏

JT が医薬事業に進出したのは 1987 年。以来、着実に蓄積した技術やノウハウを結実させ、急速に存在感を増しています。1998 年には鳥居薬品をグループ会社に迎え、主に JT が研究開発機能を、鳥居薬品が製造、販売及びプロモーション機能を担っています。また、海外大手製薬企業へ自社化合物を導出することや、他社化合物を導入する機会を積極的に追及することにも取り組んでいます。「世界に通用する今までになかった新薬を提供し、JT の医薬があって良かったと患者様に喜んでいただきたい、そうした思いで研究開発に取り組んでいます」と医総研 / 化学研究所・グループリーダーの前田公也氏。患者様の目線で真のアンメットメディカルニーズ (注) を探り、有効性や安全性で明確に差別化された独創的な「First in Class」創薬に注力しています。

実際、医総研は、抗 HIV 薬スタリビルド配合錠の有効成分の一つである HIV インテグラーゼ阻害薬エルビテグラビル、世界初の MEK 阻害メラノーマ治療薬メキシストの有効成分であるトラメチニブなど、画期的な新薬を世に送っています。「化合物を創るところから、患者さんの元に届くまで大体 10 年は必要ですから、2000 年代の初頭にここで開発された化合物が 2010 年代以降、医薬品に結実していったと言えるでしょう」(前田氏)。

## 導入の背景

化学の研究開発を強力支援するツール

創薬でシステムの果たす主な役割は、データ解析と、データベースに蓄積された情報の抽出の二つ。「創薬では非常に多くの化合物を合成します。そこで以前に作ったことがあるか、過去文献に掲載されたかななどを調べる必要があります。これらの業務がシステムで効率化されました」と医総研 / 研究企画部・グループリーダーの川上浩氏は語ります。しかし 1998 年以降の旧システムは 2018 年にサポートを終了するため、2014 年から後継システムを検討しました。

(注) いまだ有効な治療方法がない疾患に対する医療ニーズ



日本たばこ産業株式会社  
医薬総合研究所研究企画部  
グループリーダー  
理学博士  
川上 浩氏

「化学系の研究開発をこれまで以上に強力支援するツールにしたいと考えました」(川上氏)。

医総研では、今後のシステムを多角的に検討する検討委員会を設立。そのメンバーで、研究現場のニーズをすくいあげる使命を担った、医総研 / 化学研究所・主任研究員の安江克尚氏は、「従来は、ITに詳しい人間がそばにいないと必要な情報を集めるだけでも大変でした。各研究者は旧システムのデータベースを使って自分のパソコンに個人用のデータベースを作って管理する状態でしたから、元のデータベースが更新されると再度システムにアクセスし、自分のパソコンのデータベースを作り直していたのです。そうした労力の解消も懸案でした」。

利用していたパッケージソフトも、研究者から見ると化学構造式に弱い点があり、これも解決したい点でした。また研究では新規に合成する化合物が規制に抵触しない物質かどうかなどのチェックが欠かせませんが、そうした業務を効率化したいという期待もありました。

富士通は医総研にハードウェアのリプレースと合わせ、化合物登録システム(以降、JChem システム)、電子実験ノートシステム、試薬管理システム(以降、化合物管理システム)の3つのソフトウェアを提案しました。

医総研には、個々の研究者の意思を尊重する、自由度が高い風土があり、システムもそれに合うことが一つのポイントでした。「JChem システムは個人がカスタマイズして使えるのに対し、他社が提案したシステムは、全体的なデータ管理に重点が置かれ、難しそうな印象を受けました。これは設計思想の違いと思われるが、現場の評価は圧倒的に前者が高かったですね」(安江氏)。

また、旧システムにはない、化学構造式に強い特性を JChem システムは持っていました。「画期的なのが併せて提案いただいた「JChem for Excel」。これには化学構造式を使ってデータベースを検索できる機能があり、化学研究者の“化学構造式で考える”という特質にぴったりでした」(安江氏)。加えてこのシステムを富士通というトップクラスの ICT 企業が正式サポートする点も大きな安心感につながったそうです。

## 導入と効果

### 研究者の本来業務を支援

導入後の効果は期待通りでした。

まず、JChem システムではデータ収集が大幅に効率化されました。「従来は合成した化合物のデータを収集するとき各研究者の作業が必要で、グループを横断するプロジェクトではデータベースの共有だけでも一苦労でした。今は一人の研究者が代表してデータを収集し、他のメンバーはID とパスワードで中央のシステムにアクセスすれば、希望のデータを利用できます」(安江氏)。

- 本カタログ記載の会社名、製品名等は、各社の商標または登録商標です。
- 記載されている内容については、改善などのため予告なしに変更する場合がありますのでご了承ください。

電子実験ノートシステムも好評でした。

「実験データは紙のノートに記録していたため、必要な情報を探すのに手間がかかりましたが、今は電子化されたので楽に検索ができます。メンバー間の実験情報の共有もすぐにできます」(前田氏)。また化合物への法規制チェックが自動化され、業務が大幅に効率化されました。「無駄な作業が減り、研究者がすべき考察と創造により多くの時間を割けるようになりました」(川上氏)。



日本たばこ産業株式会社  
化学研究所  
主任研究員  
工学博士  
安江 克尚氏

## 富士通への評価と期待

### 迅速なレスポンスなどを高く評価

富士通のサポートには高い評価をいただいています。メールでの情報交換のほか、情報共有のための質問票をエクセルで作り、両社がアクセスできる共有サイトに保存、医総研がそれに質問を書き込み、富士通が回答をするしくみも作って問題点・疑問点を解消。また双方が参加する定例会議の他、「分科会」と称する会議を設け、細かい部分を確認しました。ウェブ会議も活用し、大阪と東京に離れていても密接なコミュニケーションを図ることができました。「『要件定義』の意味すらよく知らなかった集団が1年半でシステムを刷新できたのは富士通のサポートあってのことだと感じます」(安江氏)。

導入後も問い合わせなどへの迅速なレスポンスに満足されています。「新システムは不可能だったことを可能にしてくれました。今後も富士通には最新の IT について教えてほしいと期待しています」(安江氏)。

今、新薬開発が難易度を高め、ゲノム解析、AI などさまざまな手段を駆使しての開発が必要になってきています。そうした中、新しいシステムは医総研の次のステップに貢献していくでしょう。

## 概要

ひと  
の  
と  
き  
を、  
想  
う。

日本たばこ産業株式会社  
医薬総合研究所

所在地 大阪府高槻市紫町1-1  
所 長 大川 滋紀  
創 立 1993年  
ホームページ <https://www.jti.co.jp/pharma/index.html>

2019年2月

## お問い合わせ先

富士通コンタクトライン (総合窓口) **0120-933-200**

受付時間 9:00~17:30 (土・日・祝日・当社規定の休日を除く)

富士通株式会社 〒105-7123 東京都港区東新橋 1-5-2 汐留シティセンター