

バイオグリッド研究会2014
～バイオビッグデータの可能性～

バイオグリッドHPCIプロジェクトの 経過報告と今後

NPO法人バイオグリッドセンター関西
(公益財団法人都市活力研究所)
志水隆一

2014年5月31日



「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」での
アンケート・ヒアリング結果より

- トライアルユースをしたい



HPCI準備段階コンソーシアムで提言し、HPCI
システムの産業利用枠を創設

- 利用支援がほしい



インシリコ創薬支援事業の開始

- 成功事例を見たい



HPCI産業利用枠でプロジェクトを実施



プロジェクトの概要

(1) 蛋白質(キナーゼ、GPCR)631個と化合物3000万
(29,287,971)個の相互作用を計算する

利用アプリ:CGBVS



(2) 上記のうち蛋白質数個×化合物10-20個について
結合自由エネルギーを計算する(プロジェクトの評
価・諮問員会で選択)

利用アプリ:MP-CAFEE



3

プロジェクトのねらい

(1) アプリケーションの産業利用可能性の検証

(2) ワークフローの構築

(3) 製薬企業の「京」利用スキルの習熟

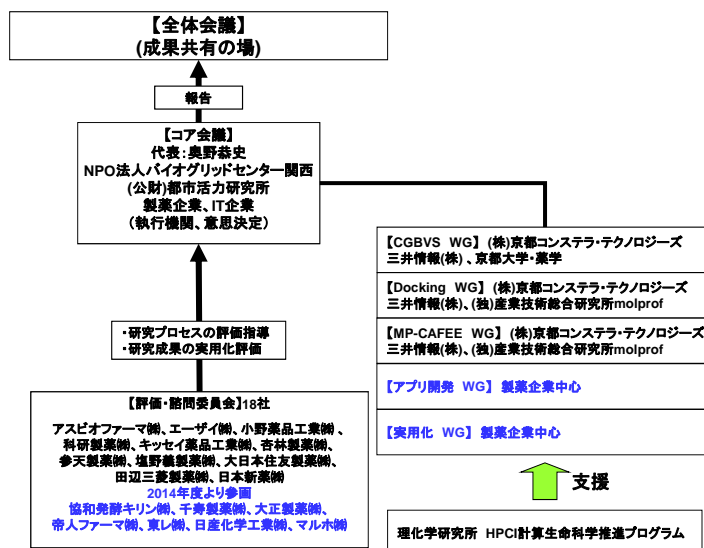


(4) スパコン利用者のコミュニティの形成



4

プロジェクトの体制とメンバー



5

参画メンバーのメリット

- 製薬企業 新規開発手法の確立
 - 相互作用行列の利用
 - MP-CAFEの利用
- IT企業 新規事業の開発
 - HPCI関係のコンサル、受託計算
- バイオグリッドセンター関西、理化学研究所
 - 産業振興、産業利用の促進



6

KBDDプロジェクト2014

新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

(K supercomputer-based drug discovery project by Biogrid pharma consortium)



ID:hp140042

リソース:「京」50万ノード時間、阪大GPGPU 39万ノード時間

申請主体: NPO法人バイオグリッドセンター関西

製薬関連企業(11社→18社):

アスピオファーマ、エーザイ、小野薬品工業、科研製薬、キッセイ薬品工業、杏林製薬、参天製薬、塩野義製薬、大日本住友製薬、田辺三菱製薬、日本新薬、協和発酵キリン、千寿製薬、大正製薬、帝人ファーマ、東レ、日産化学工業、マルホ

IT企業(2社): 京都コンステラ・テクノロジーズ、三井情報大学等

京都大学医学研究科、産業技術総合研究所、神戸大学、理研AICS、先端医療振興財団

事務局: 都市活力研究所

・リーダー: 奥野(京大医)

・サブリーダー: 広川(産総研)

・プロジェクトマネージャー: 志水(都市活研) * 事務管理担当

・プロジェクトマネージャー: 中津井(神戸大工) * 計算進捗管理担当

・評価諮問委員会: 岡本(アスピオ)、服部(塩野義)・MPCAFEE WG: 荒木(理研AICS)

・Docking WG: 佐藤(MKI) ・CGBVS WG: 金井(KCT) ・アプリ開発WG: 佐藤(MKI) ・実用化WG: 村上(KCT)



7

2013年度の結果

・ CGBVS

– 蛋白質(キナーゼ、GPCR)631個と化合物3000万(29,287,971)個の相互作用を計算

– 計算時間 5時間45分

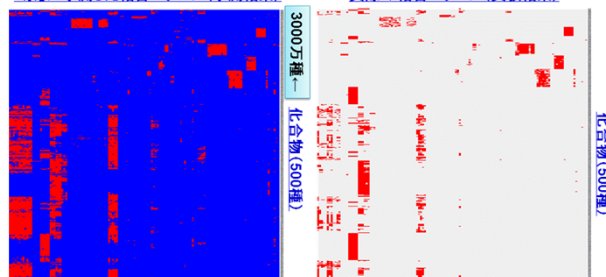
・ 9600node*20748sec/3600sec/hour=55328node*hour(nh)

・ 京大ラボのマシン (Xeon2.4GHz 8core)マシン

– 16ノードを使用した場合→18293時間=762日・・・約2年

「京」が予測した結合パターン(予測結果)

実際の結合パターン(実験結果)



GPCR(139種)

赤: 結合する(スコア > 0.8)
青: 結合しない(スコア < 0.8)

GPCR(139種)

赤: 結合する(<30μM)、青: 結合しない(>80μM)、
灰: 実験データ無し



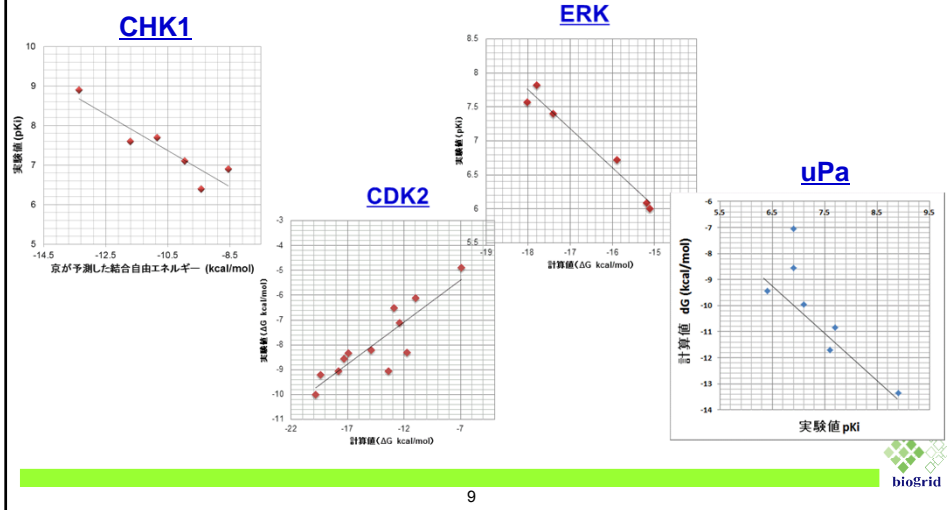
8

- MP-CAFEE

- キナーゼ4種類について計算実行

- CHK1、CDK2、ERK2、uPa

- 計算時間(1化合物) 平衡化 5000-8000nh 非平衡 10000nh



9

2013年度まとめ

- CGVBS

- 計算終了、実験値との評価、参画の製薬企業に計算結果を配布

- MP-CAFEE

- キナーゼ4種について計算実施

- ワークフロー構築

- 計算結果と実験値の整合性確認

- リソース利用状況

- 割当5,000,000 node*hour

- 利用4,832,756 n*h(96.7%)



10

2014年度の予定

- **MP-CAFEEのワークフローの確立**
 - キナーゼ
 - 結晶構造のない状態からの計算を実施
 - GPCR
 - 計算ワークフローの確立
 - 力場の検討
- **アプリ開発WG、実用化WGの設置**
 - アプリ開発WG
 - 2013年度理研で開発したGROMACSviewer(仮称)のカスタマイズの実施
 - 実用化WG
 - 京の有償利用枠の利用を目指して仕組み、仕掛けの検討を行う。支援サービス、パッケージ、ツールなど



bioGrid