

2012年9月7日

報道機関各位

NPO 法人バイオグリッドセンター関西

担当：志水隆一

e-mail : shimizu@urban-ii.or.jp

## 「平成24年度 HPCI システム利用研究課題」採択について

バイオグリッドセンター関西は、情報技術とバイオ、医療の融合分野における研究開発の支援を行っている NPO 法人ですが、このたび（財）高度情報科学技術研究機構が実施する表記利用研究課題公募に、京都大学などの大学や研究機関ならびに製薬企業・IT 企業 9 社との共同で応募し採択されました。この課題では、化合物とタンパク質との相互作用の世界最大規模の組合せの中から医薬品候補化合物をスパコン「京」で探索することに挑戦します。このような大規模計算は「京」を用いることで実現される世界初の試みとなります。また、本研究を通じて、製薬企業が実践的に「京」を利用して医薬品開発が行えるインフラ構築を行い、我が国の新薬創出の飛躍的向上に貢献するものとなります。

具体的には、世界最大クラスの化合物データベース PubChem 搭載の約 3000 万化合物と約 350 種類の創薬標的タンパク質（Kinases、GPCRs）との大規模相互作用スコア行列（総数 105 億相互作用）を CGBVS（Chemical Genomics-based Virtual Screening）により計算します。更には、参画製薬企業の研究者・技術者からなる評価・諮問委員会において、臨床現場における創薬ニーズ、タンパク質の druggability、候補化合物の druglikeness 等の評価を行い、創薬標的として有望な Kinases と GPCRs それぞれ 5 種類、計 10 種類に対する候補化合物 35 個程度について、MP-CAFEE を用いた結合自由エネルギー計算を行い、最終的な医薬品候補化合物を選別するというものです。（図 1・図 2 参照）

参画機関は、

大学・研究機関：京都大学・薬学研究科、（財）都市活力研究所、（独）産業技術総合研究所

IT 企業：（株）京都コンステラ・テクノロジーズ、三井情報（株）

製薬企業：アスピオファーマ（株）、エーザイ（株）、小野薬品工業（株）、キッセイ薬品工業（株）、参天製薬（株）、塩野義製薬（株）、日本新薬（株）

また、2次募集の結果

科研製薬（株）、大日本住友製薬（株）、田辺三菱製薬（株）が参加しました。

問合せ：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

担当：志水隆一

e-mail : shimizu@urban-ii.or.jp

TEL : 06-6344-2665

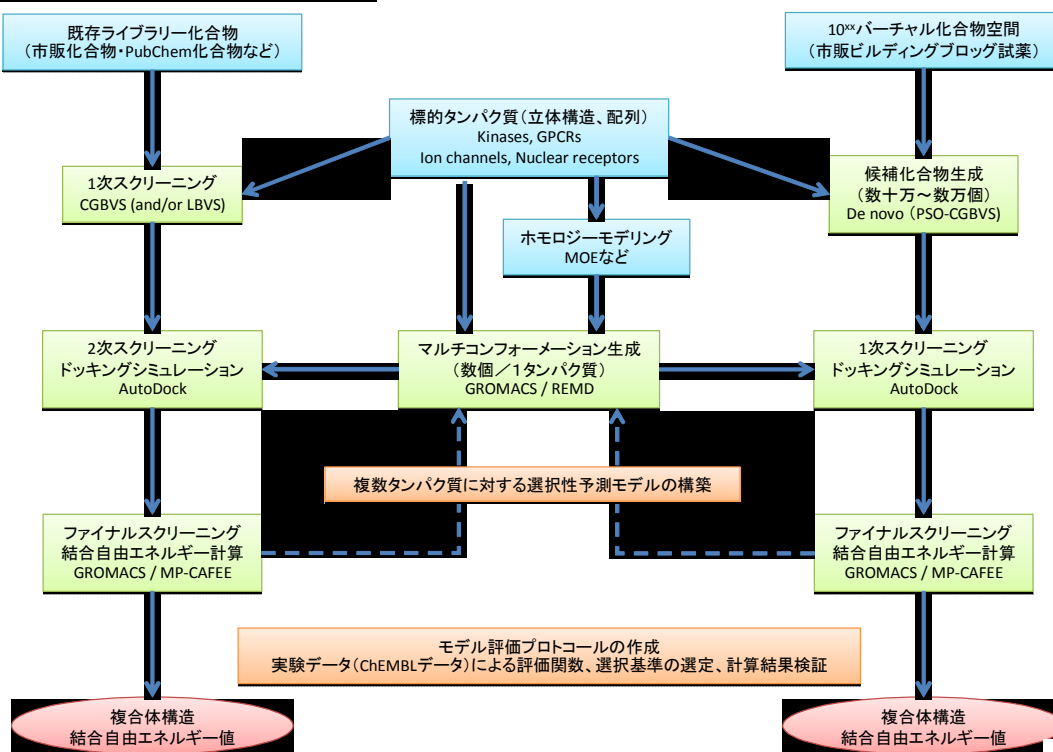
大阪市北区梅田 1-12-39 新阪急ビル 9F



# 「京」に構築するインシリコ創薬基盤概要

## 当該申請において構築するフロー

## 将来に運用予定の追加フロー



\* 最終的に緑Boxのプログラムの「京」実装を目指します。

図1 平成24年度 HPCI システム利用研究課題

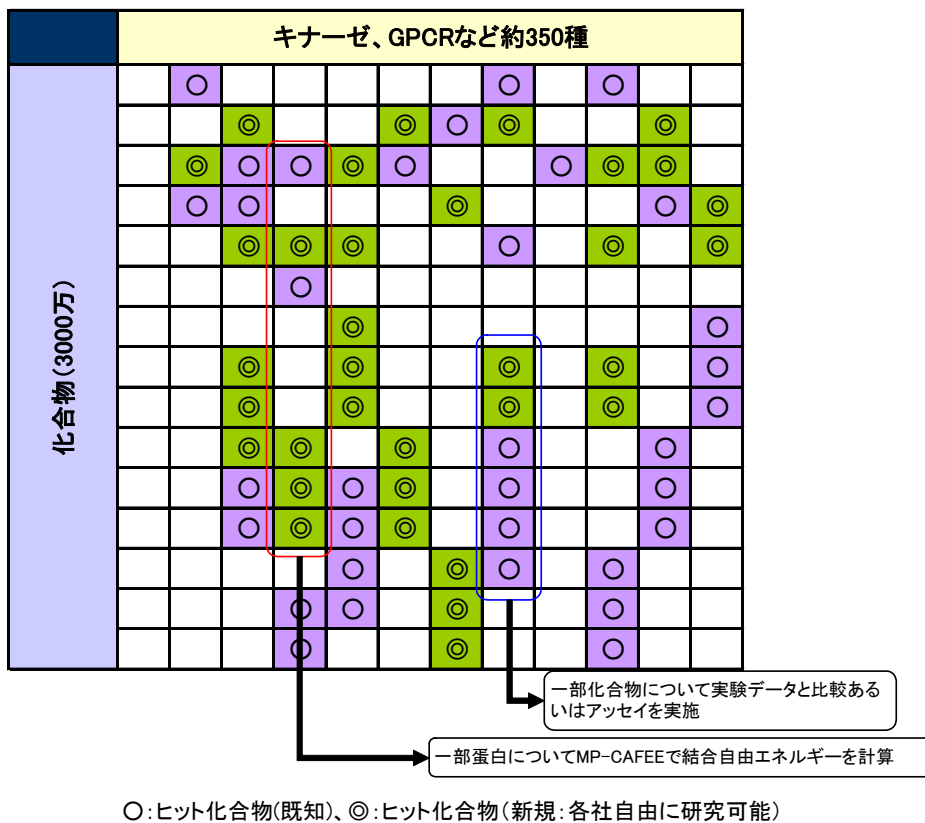


図2 相互作用スコア行列のイメージ