

hp120048: 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築



NPO法人バイオグリッドセンター関西／課題代表：奥野恭史（京都大学薬学研究科）

● 「京」による製薬業界のオープンイノベーション

KBDDコンソーシアム：“K” supercomputer-based drug discovery consortium



申請主体(事務局)：NPO法人バイオグリッドセンター関西
研究代表 京都大学薬学研究科 奥野恭史

製薬企業(11社)：

アスピオファーマ、エーザイ、小野薬品工業、キッセイ薬品工業、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、科研製薬、杏林製薬

IT企業(2社)：(株)京都コンステラ・テクノロジーズ、三井情報(株)

大学等：京都大学薬学研究科、(独)産業技術総合研究所、理研HPC企画調整グループ、
(公財)都市活力研究所

- ・コンピュータ創薬の根本課題に挑戦
- ・製薬会社による現場利用に耐えうる計算フロー(計算精度と計算時間)の構築
- ・我が国のコンピュータ創薬の中心拠点形成

● コンピュータ創薬への期待

化合物の種類：10⁶⁰以上

膨大な候補化合物から医薬品を探し当てるために多くの無駄な実験と失敗を伴う

①結合するかどうかを予測

タンパク質と化合物の
膨大な組合せ

②結合の強さを予測

タンパク質の種類：10万以上

解熱鎮痛剤 花粉症の薬 抗インフルエンザ薬 抗癌剤

実験の代わりに計算機上で化合物とタンパク質の結合をシミュレーションする
⇒開発費用の削減への期待

● 「京」による医薬品開発効率の抜本的解決

実験の代わりにコンピューター上で結合をシミュレーションする ⇒ 開発費用の削減への期待

①結合するかどうかの予測

現状

計算時間がかかるため、全ての化合物を計算するのは不可能

現状のコンピュータ創薬技術は医薬品開発効率の抜本的な解決にならない

計算機パワーの問題

②結合の強さの予測

予測精度が悪すぎる - 正答率:5%程度

京

化合物とタンパク質の結合予測の超高速化

コンピュータ創薬の
ブレークスルー

「京」の圧倒的な計算機パワーで医薬品開発効率の抜本的な解決を目指す

CGBVS法 : Chemical Genomics Based Virtual Screening

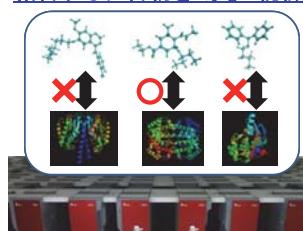
膨大なタンパク質と化合物の組合せを高速計算するために、パターン認識技術を適用

大量のタンパク質と化合物の結合データを学習

論文等で結合することが分かっているタンパク質と化合物の結合ペア(12万ペア)の機械学習



病気の原因タンパク質に
結合する化合物を「京」で認識



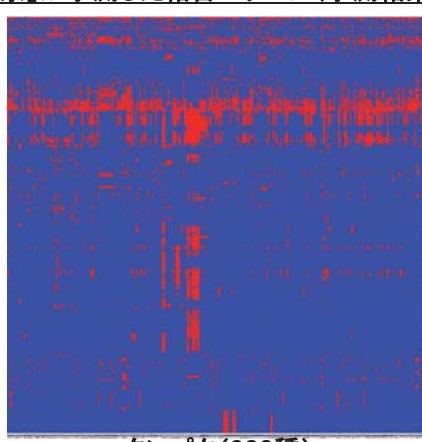
「京」により超高速予測を実現

世界最大規模(189.3億ペア)の結合予測
631種の疾患原因タンパク質と3000万種の化合物の全組合せの計算
を5時間45分で完了。(汎用機では約2年かかる。)

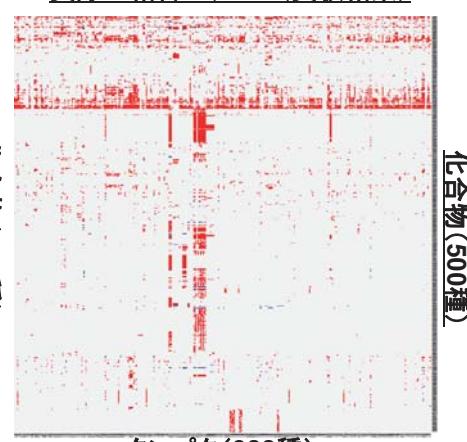
以後、予測結果を基に、各製薬会社が独自に医薬品開発を行う

CGBVS法による予測と実験結果との比較

「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)

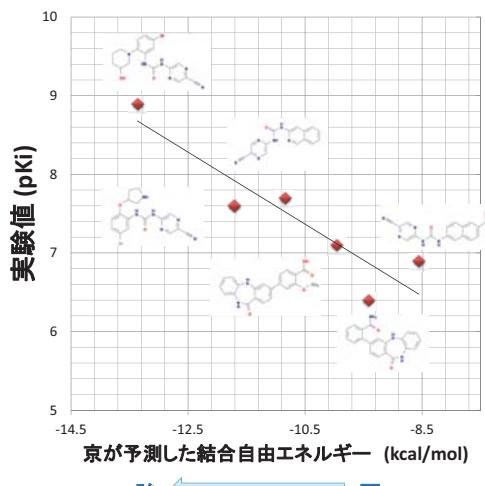


化合物(500種)
化合物(500種)

タンパク(388種)

タンパク(388種)

MP-CAFE法による予測と実験結果との比較



謝辞

- ・KBDDコンソーシアムメンバー
- ・理研・計算科学研究機構
- ・高度情報科学技術研究機構
- ・最先端次世代研究開発支援プログラム
- ・NEDO若手研究グラン