

バイオグリッドセンター関西における 人材育成への取組

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

2013年10月21日



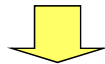
1

バイオグリッドセンター関西の取組み(1)

文部科学省 ITプログラム

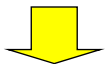
「バイオグリッド・プロジェクト」(2002-2006年)

高速大容量コンピュータのバイオ分野への応用 代表:下條真司



「NPO法人バイオグリッドセンター関西」(2004年設立)

バイオグリッド・プロジェクトの研究成果の産業応用



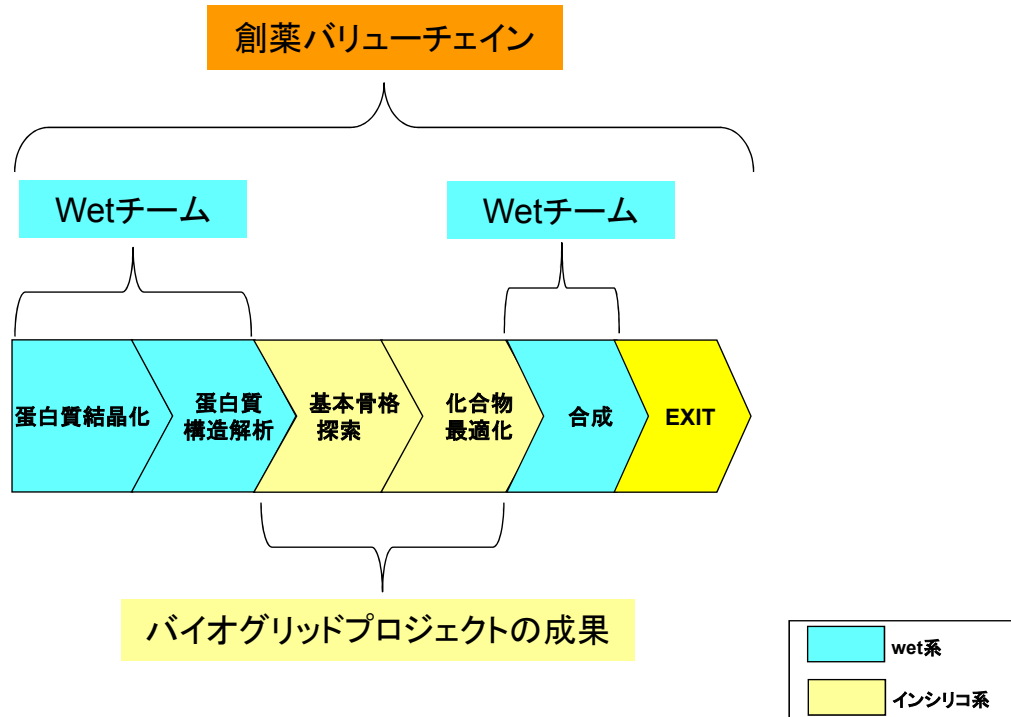
「創薬バリューチェーンプロジェクト」開始(2005年)

Wet系も巻き込んだ実際の創薬プロジェクト



2

創薬バリューチェーンとは

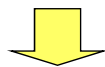


3

バイオグリッドセンター関西の取組み(2)

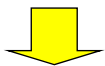
「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」発足(2009年)

主催:(財)都市活力研究所、産応協、(財)計算科学振興財団



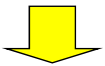
「HPCI準備段階におけるコンソ」採択(2010年)

産業利用検討WGメンバーとして活動



「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」でアンケート、ヒアリングを実施(2011年)

「京」に対する要望などを集約



産業利用枠において「京」の創薬プロジェクト採択
インシリコ創薬支援事業開始(2012年)

4

「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

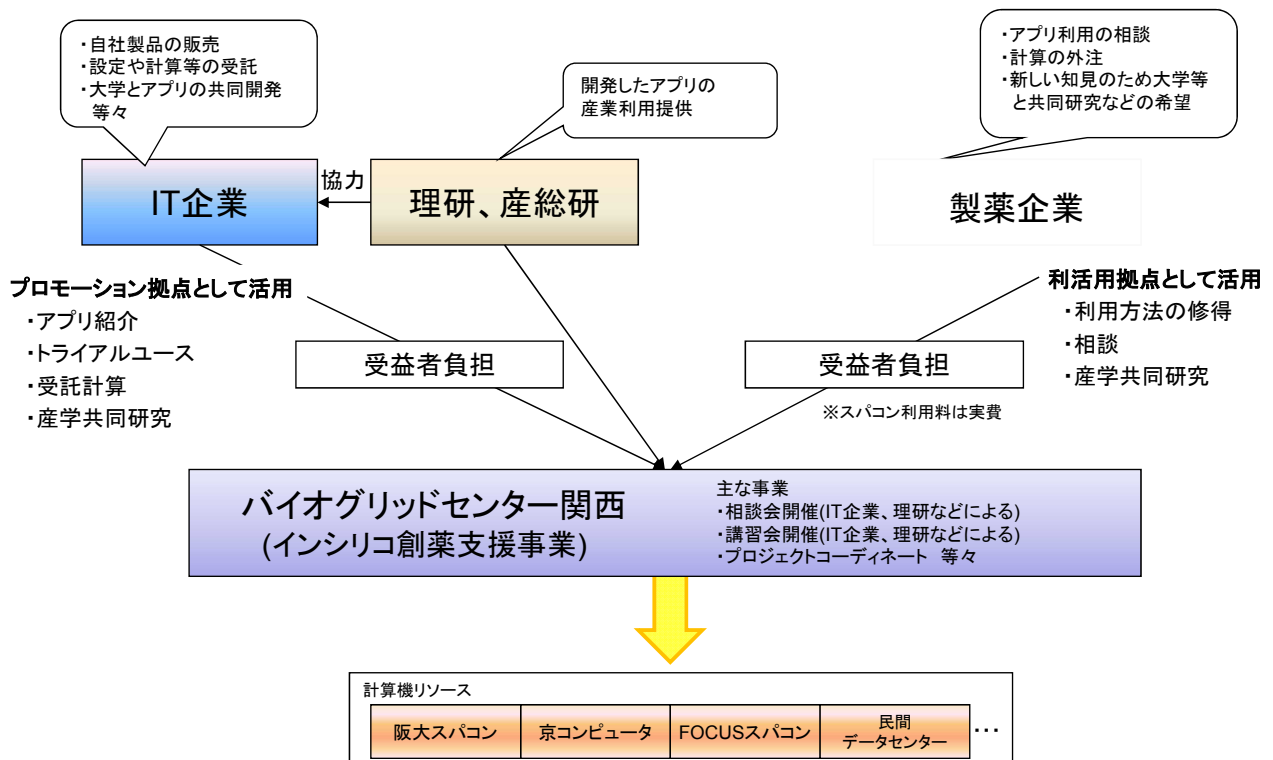
- ・ 成功事例を見たい



HPCI産業利用枠でプロジェクトを実施



「インシリコ創薬支援事業」スキーム図



インシリコ創薬支援事業の実績

- 対象：製薬企業
- 参加者：各回10名程度
- 2012年度
 - トライアル実施（「京」アプリは理研GCと共催）
 - 9回実施 「京」アプリ：5回、国研アプリ：1回、流通アプリ：3回
- 2013年度（「京」アプリは理研ISLiMと共催）
 - 「京」アプリの講習会3回、実習2回



7

HPCI産業利用枠利用による 実践的な人材育成

- 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



8

HPCI産業利用枠

- 課題名: バイオグリッドHPCIプロジェクト「新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築」
- 課題ID: hp120048
- 英語名: KBDD (K supercomputer-based drug discovery project by Biogrid pharma consortium)
- 割当資源: 500万ノード時間
- 実施内容: 化合物探索ツールの評価
- 特徴: 製薬企業11社が参画し、産業利用の視点での評価・検証



9

HPCIプロジェクトの概要

(1) 蛋白質(キナーゼ、GPCR)600個と化合物3000万個の相互作用を計算する

利用アプリ: CGBVS(京大・薬・奥野)

Chemical Genomics Based Virtual Screening



(2) 上記のうち蛋白質10×化合物35程度については結合自由エネルギーを計算する

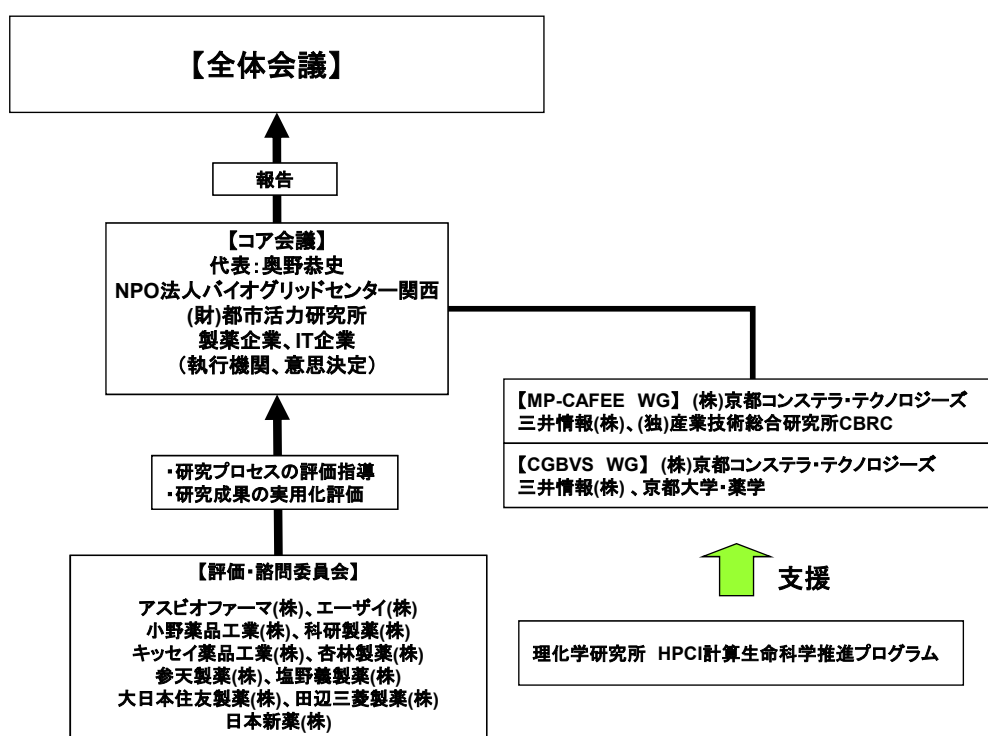
利用アプリ: MP-CAFEE(東大・生産研・藤谷)

Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy



10

HPCIプロジェクトの体制とメンバー



11

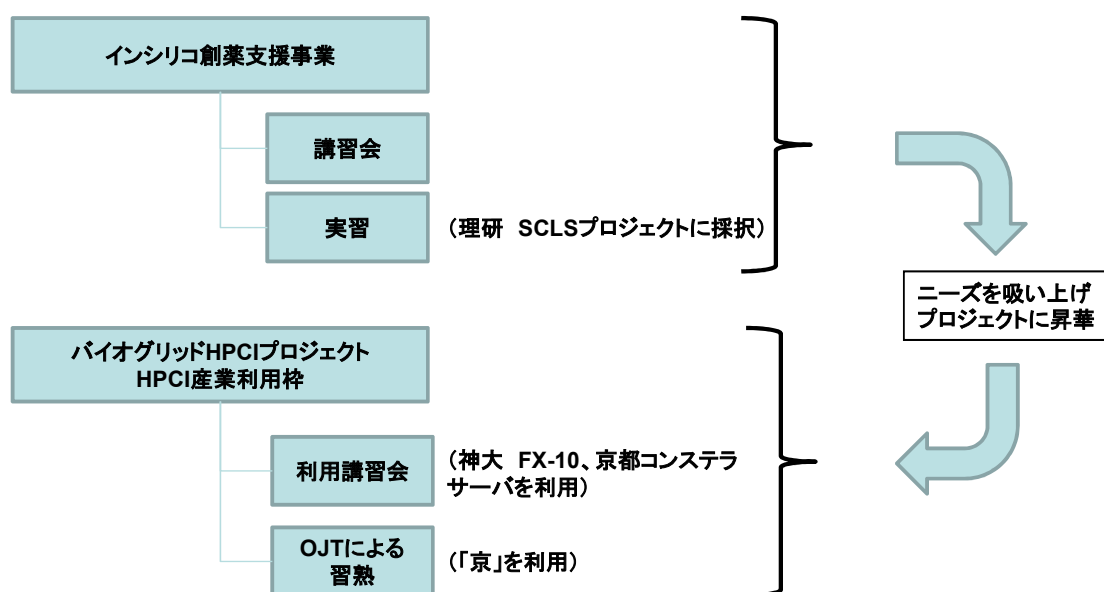
HPCIプロジェクト参画メンバーの メリット

- 製薬企業 新規開発手法の確立
 - 相互作用行列の利用
 - MP-CAFEE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



12

人材育成事業の相関



人材育成事業の方向性

- インシリコ創薬支援事業
 - 国プロアプリにシフト
 - 流通アプリは代理店のサポートが充実
 - マニュアル、導入支援、利用支援
 - 新たなプロジェクトの仕込み
- HPCI産業利用枠の利用
 - 実践的な利用習熟
 - 利用促進のコミュニティーの形成
 - 製薬企業の壁を超えた本音の議論が展開
 - 2014年度も応募し継続してプロジェクトを実施してほしいとの要望
 - 課題
 - プロジェクトの運営資金
 - IT企業が手弁当で協力

製薬業界における利用者像

- コンピュータの専門家はいない、ほとんどのバックグラウンドはケミカル→導入支援、利用支援が必要
- あくまでユーザとしての利用。(自動車、機械メーカーと違いソースコードを自身で改良するということはない)
- 自社単独では手が付けられないので他社やIT企業の協力が必要
- このアプリで薬ができるわけではない、分子レベルの挙動解析(予測)ができればよいと認識



15

製薬業界でのHPCI利用者

- 新薬を開発できる製薬企業(国内)
 - 年間売上700億円以上が目安
 - 25社程度
 - うちスパコンを利用できる企業(人材、設備)
 - 20社まで



- 上記の新薬開発企業の後押し
- 裾野の拡大(参入障壁の低減)
 - 中小、ベンチャーの製薬企業が新薬開発に参入
 - 異業種(化学会社など)の参入



16