



令和4年6月28日

「富岳」を活用した創薬DXを目指す研究課題が 「富岳」Society 5.0 推進利用課題として採択されました！

スーパーコンピュータ「富岳（ふがく）」を活用した創薬DXを目指す研究課題（課題名：「富岳」を基軸とした創薬DXプラットフォームの構築、申請者：一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム）が、「富岳」Society 5.0 推進利用課題として採択されました。7月1日より実証研究（2年間）が開始されますので、以下の通りお知らせします。

スーパーコンピュータ「富岳」は、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するための最先端の研究基盤として、令和3年3月に共用を開始しました。共用開始後は、一般・産業利用課題をはじめとする幅広い課題で活用されており、成果創出に向けて様々な取組を進めています。

令和3年からは、Society 5.0の実現に資する成果を「富岳」を用いて早期に創出するため、産学官の連携の取組を重視した「富岳」Society 5.0 推進利用課題の公募を開始しました。

審査の結果、一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム（LINC[※]）より申請のあった研究課題「富岳」を基軸とした創薬DXプラットフォームの構築の採択を決定しましたので、お知らせいたします。

本課題は、従来長い期間をかけて行われてきた創薬フローについて、これを自動化・効率化するハイパフォーマンス・コンピューティング/AI技術を「富岳」に実装することで、創薬の研究開発に利活用できる創薬DXプラットフォームの構築を目指すものです。また、そのために必要となる大規模な創薬知識データベースを構築し、製薬企業等への提供も目指します。将来的には、このプラットフォームが商用クラウド上でサービス化され、医薬品開発の効率化、創薬分野における国際競争力の強化などにつながることが期待されます。詳細は、別添のLINCによるプレスリリースをご覧ください。

引き続き、「富岳」の着実な運用を通して、産学の多様な分野のユーザが「富岳」を活用し、Society 5.0の実現に資する成果が創出されるよう、取組を進めてまいります。

※ 一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム (LINC)

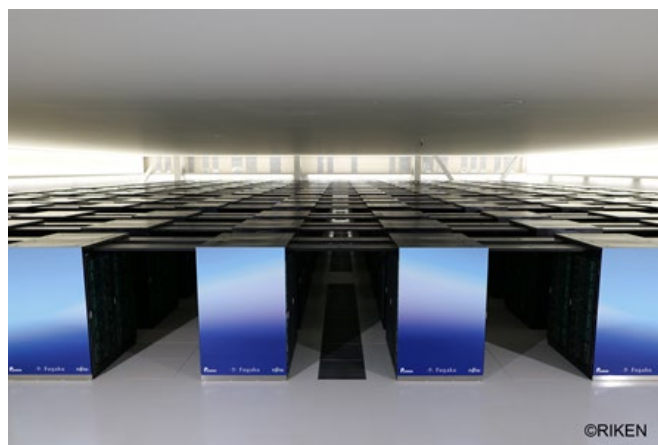
理化学研究所、京都大学、医薬基盤・健康・栄養研究所を中心とするアカデミアのコーディネートのもと、製薬企業を中心とするライフサイエンス系企業、IT企業が多数参画する産学連携のDX推進を目指すコンソーシアム。(2021年4月発足)

参考 スーパーコンピュータ「富岳」とは

スーパーコンピュータ「富岳」は、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するための最先端の研究基盤として、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目的として平成26年度より開発を開始しました。

新型コロナウイルス感染症への対応を含め、我が国が直面する課題の解決や科学技術の発展、産業競争力の強化へ可能な限り早期に貢献していくため、当初予定を前倒し、令和3年3月9日に共用を開始しました。

共用開始後は、産業界も含む幅広い研究者、関係省庁による利用が開始されるなど、早期の成果創出に向けて様々な取組を進めています。



スーパーコンピュータ「富岳」

参考 「富岳」Society 5.0 推進利用課題とは

Society 5.0の実現に資する成果を「富岳」を用いて早期に創出するため、令和3年より公募を開始し、採択された課題に対して富岳の産業利用枠の一部を割り当てることとしています。この枠組みでは、産学官で連携し、近い将来の社会実装を見据えた取組を重視しており、課題実施者には、社会実装を担う企業または自治体等公的機関が参画していることを要件としています（応募は随時受付）。

https://www.mext.go.jp/b_menu/boshu/detail/mext_00169.html

<担当>

文部科学省 研究振興局 参事官（情報担当）付
計算科学技術推進室

専門官 谷本 順矢

企画推進係長 中野 孝一

電話：03-5253-4111（代表）

03-6734-4275（直通）

報道関係各位

2022年6月28日

一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム

「富岳」を機軸とした創薬 DX プラットフォームの構築」で 「富岳」 Society 5.0 推進利用課題に採択

一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム（以下、LINC）は、文部科学省が推進する「富岳」 Society 5.0 推進利用課題に初めての課題として採択され、「スーパーコンピュータ「富岳」を機軸とした創薬 DX プラットフォームの構築」（以下、本課題）を開始いたします。

「富岳」 Society 5.0 推進利用課題は、「富岳」に求められている Society 5.0 の実現に資する成果を早期に創出すること、Society 5.0 時代にスーパーコンピュータに期待される新たな役割も念頭に、Society 5.0 を担う潜在的なスパコンユーザーへの利用拡大を図ることを目的としています。

採択された本課題では、これまでに理化学研究所（理研）、京都大学（京大）、医薬基盤・健康・栄養研究所（医薬健康研）等で開発してきた「創薬ターゲット探索」から「リード化合物創出」に至る創薬フローを構成する HPC^{*注}/AI 技術を「富岳」に実装することで、HPC/AI 創薬プラットフォームを構築するための試験研究を行います。加えて、創薬において重要な探索ステップである「化合物スクリーニング」と「創薬ターゲット探索」について、「富岳」を用いた海外メガファーマの 100 倍規模の数 10 億化合物で行う「超大量仮想スクリーニング」の実現と世界初の「大規模ネットワークデータベース」を構築し、それらを統合して製薬企業等のライフ系企業・アカデミアへ提供することを目指します。

将来的には「富岳」をベースに構築された本プラットフォームが、本邦の創薬分野での国際競争力強化につながり、Society 5.0 が目指す健康・医療分野での個人への最適な治療を提供するために必要な薬物の早期提供に貢献し、製薬だけでなくライフサイエンス分野へ幅広く波及し、国民の健康長寿増進に資することが期待できます。

*注：ハイパフォーマンス・コンピューティングの略で、膨大なデータに対し複雑な演算処理を高速に実行すること

❖ 本件に関する問い合わせ先

一般社団法人 ライフインテリジェンスコンソーシアム 事務局 志水 隆一（しみず りゅういち）

TEL：06-6359-1322 FAX：06-6359-1329

E-mail：linc-jimu※linc-ai.jp （※をアットマークに変換してください）

ホームページ：https://linc-ai.jp/

❖ 「富岳」を機軸とした創薬 DX プラットフォームの構築」事業

■実施体制

LINC の参加企業と理研、京大、弘前大学、医薬健栄研が協力して、研究開発、評価、事業化検討を進めます。

	研究開発	評価	事業化検討
HPC/AI 創薬プラットフォーム	理研 R-CCS、京大、 LINC 参加 IT 企業	LINC 参加全企業	LINC 事務局 理研 R-CCS Society 5.0 推進拠点
超大量仮想スクリーニング	理研 R-CCS、京大、 LINC 参加 IT 企業・ライフ系企業・製薬企業	LINC WG04 参加企業	
大規模ネットワークデータベース	京大、弘前大、医薬健栄研	LINC WG02 参画企業 (内閣府 PRISM 事業での評価も実施)	

■S5 推進利用の研究期間

令和 4 (2022) 年 7 月 1 日 ~ 令和 6 (2024) 年 6 月 30 日

■今後の展望と期待できる成果

研究期間 (2022-2024 年) に、データベース構築及びプラットフォームの「富岳」実装と LINC 参加企業による評価を含む小規模技術実証を行います。2024 年度には、「富岳」有償利用の枠組みを用い、LINC に参加する製薬企業等のライフ系企業・アカデミアによりテスト運用します。2025 年度には民間の商用クラウド上に「富岳」同様の環境を作り、有償サービス化して LINC 外の製薬企業等のライフ系企業・アカデミアにも提供し、本格運用することを目指します。

本課題で構築する「HPC/AI 創薬プラットフォーム構築」、「超大量仮想スクリーニング」及び「大規模ネットワークデータベース」を「富岳」を中核として充実することにより、将来的に創薬の研究開発に利活用できる創薬 DX プラットフォームを構築・運用し、さらにコンソーシアムとして商用サービスを継続的に提供する体制構築が期待できます。これにより海外に比べて規模が小さい国内の製薬企業やベンチャー企業、アカデミアなどの創薬プロセスの効率化を実現します。将来的にはこれが本邦の創薬分野での国際競争力強化につながり、Society 5.0 が目指す健康・医療分野での個人への最適な治療を提供するために必要な薬物の早期提供に貢献し、製薬だけでなくライフサイエンス分野へ幅広く波及し、国民の健康長寿増進に資することが期待できます。(課題 ID: hp220284)

❖ ライフインテリジェンスコンソーシアム（LINC）の概要

ライフインテリジェンスコンソーシアム(代表理事 奥野恭史)は、理研、京大、医薬健栄研を中心とするアカデミアのコーディネートのもと、製薬企業を中心とするライフサイエンス系企業、IT 企業が多数参画する産学連携のDX 推進を目指すコンソーシアムです。

LINC は、ライフ業界の産業競争力を加速させるべく、これまでに 30 種以上の創薬 AI 技術開発に取り組み、本邦の Society5.0 実現に向け、創薬プロセスのデジタルトランスフォーメーションを牽引してきました。2020 年には第 2 回日本オープンイノベーション大賞の厚生労働大臣賞を受賞しており、日本のオープンイノベーションの一層の推進するために、将来的なロールモデルとして期待される先導性や独創性の高い取組として表彰されました。

今後は、LINC、理研、京大及び医薬健栄研で開発済/中の AI・HPC 技術(AI 並びに HPC におけるシミュレーション技術を含む)を IT 基盤上でプラットフォーム化することで、企業やアカデミアへのサービス展開をはかり、ライフサイエンス分野の一層のDX 推進を目指しています。

<沿革>

- 2016 年 11 月 ライフインテリジェンスコンソーシアム（任意団体）発足
(任意団体時、京大・理研・医薬健栄研等のアカデミア、ライフ系企業、IT 系企業、約 129 機関が参画)
- 2020 年 2 月 第 2 回内閣府オープンイノベーション大賞（厚生労働大臣賞）を受賞



- 2021 年 4 月 一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム 発足
(Society5.0 の実現、ライフサイエンス分野のDX の推進に向けて活動開始)
- 2022 年 6 月 会員数 85 機関、 12 のプロジェクトが進行中

<会員数（企業、団体数）推移>

