

スパコン「京」創薬研究プロジェクトにて、世界最大規模の網羅的計算を実施

～独自手法 CGBVS(*1)をスパコン「京」に実装、総数約 105 億相互作用の世界最大規模の網羅的計算を実施～

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ(以下、「コンステラ」)は、NPO 法人バイオグリッドセンター関西や、京都大学などの大学・研究機関、製薬企業 9 社、及び IT 企業との共同プロジェクト『バイオグリッド HPCI(*2)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」』に参画し、次世代スーパーコンピューター(スパコン)「京」を活用した創薬研究に取り組むことを発表します。

【プロジェクト概要】

この度、(財)高度情報科学技術研究機構により次世代スーパーコンピューター「京」を活用する研究課題が公募され、コンステラが参加するコンピューター創薬プロジェクトが産業利用枠(全 62 件採択)にて採択されました。当プロジェクトは、「京」を用いて、CGBVS を実装し約 3000 万個の化合物と約 350 種類のタンパク質のマッチングを行い、数 105 億通りとなる組み合わせの中から医薬品候補となる化合物探索を実施します。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であり、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であります。

具体的な研究計画については、世界最大クラスの化合物データベース PubChem 掲載の約 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 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いたします。

【参画機関】

申請主体	NPO 法人バイオグリッドセンター関西
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
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)、大日本住友製薬(株)、田辺三菱製薬(株)、日本新薬(株)
IT 企業	三井情報株式会社、株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ

*1 CGBVS(Chemical Genomics Based Virtual Screening)

京都大学薬学研究科システム創薬科学 奥野恭史教授が開発した開発された高速かつ高い予測精度を誇る計算手法であり、コンステラが京都大学より技術特許の独占実施権を付与されて実施するものです。

*2 HPCI(High Performance Computing Infrastructure)

「京」を中心とした国内のスーパーコンピューターやストレージを高速ネットワークでつなぎ、効率よく利用できる体制と仕組みを構築することを言います。

【会社紹介】

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズは、京都大学発ベンチャー企業として 2008 年に設立され、製薬企業・大学研究機関の創薬研究サポートを使命として、最先端の計算科学技術を提供しています。独自手法の CGBVS やドッキング計算、ファーマコフォア、QSAR などの各種受託計算サービス、PSO(Particle Swarm Optimization)を用いた医薬品の最適化設計、関連システムの提供などを通して、総合的な創薬研究支援を行っています。 URL: <http://www.k-ct.jp/>

■本件に関する連絡先

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ

担当: 山本佳宏 (Email: yamamoto@k-ct.jp)

〒604-8156 京都市中京区山伏山町 558 三洋室町ビル 304 号

Tel: 075-241-9672 Fax: 075-241-9673