

CBI 学会 2017 年大会

## 創薬専用 MD シミュレータの産学共同開発

ランチョンセミナー 10月5日(木) 12:00~13:30 研修室

主催：理化学研究所・日本製薬工業協会 共催

本ランチョンセミナーでは、現在、理化学研究所が開発中である MD シミュレータ MDGRAPE-4 シリーズの産学共同開発についてご紹介します。広く創薬の現場研究者、メーカー等の皆様のご参加とご意見をお願いいたします。

### 趣旨

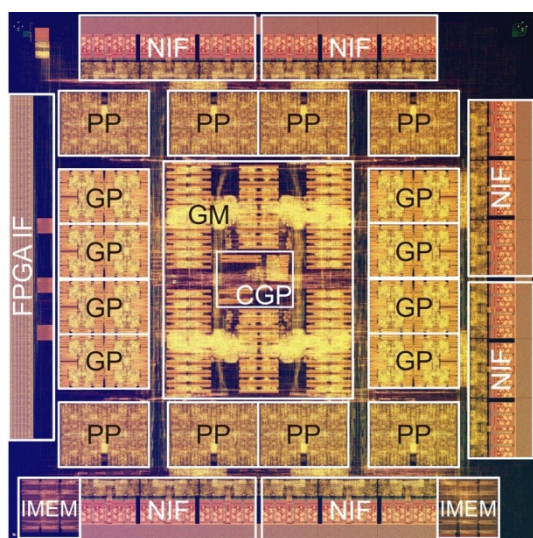
近年、革新的創薬につながる基盤技術開発のスピードアップ、産学官連携の強化、バイオベンチャーからのシーズや技術の導入の増加等を背景に、オープンイノベーションが創薬の極めて重要なプロセスとなりつつあります。特に、欧米では Pre-competitive な創薬課題に複数の企業が協同で取り組む体制が整いつつあり、2000 年代半ばより政府の資金援助の下で多数の企業が参加する複数のコンソーシアムが設立されています。このような現状下において、本 CBI 学会 2017 年大会においても、「データ駆動型研究が拓く創薬」と題して、データ階層の異なる研究の



図 1 MDGRAPE-4 筐体

融合に焦点が当てられているところです。

理化学研究所（理研）がこれまで開発してきた分子動力学計算専用計算機 MDGRAPE シリーズ（図 1 及び 2）は、このデータ駆動型研究の基盤技術としての草分けであり、現在、さらに創薬現場での実用性を高めるべくハードウェア開発の方向性をシフトしているところです。



日本製薬工業協会（製薬協）においても、MD シミュレータの活用に際しては、創薬現場のニーズを踏まえた技術開発の促進が重要となることから、今後の開発者－利用者連携においては、大きな傘となるコンソーシアムのもとで、創薬テーマも含めた幅広い連携を目指すことが望ましいと考えています。

図 2 ネットワークと汎用 CPU をシステムオンチップに集積

このような背景の中で、本セミナーの目的は、理研において開発中の MD シミュレ

ータの開発状況および創薬利用の可能性の共有、また、共同開発に関する議論を進め、日常の創薬で使いやすい計算機の実現、さらに完成後のスムーズな創薬利用を可能とするための体制構築にあります。広く創薬の現場研究者、メーカーなど多様な方々のご参加とご議論をお願いいたします。

お問い合わせ先

理化学研究所 創薬・医療技術基盤プログラム

（メールアドレス）：[mdgrape-contact@ml.riken.jp](mailto:mdgrape-contact@ml.riken.jp)