

クラウドを活用した創薬研究の動向と手法

1. エーザイの創薬研究における AWS 活用事例

長岡 和也

エーザイ株式会社

hhc データクリエーションセンター データサイエンスラボ

2. 創薬研究基盤としてのクラウドの活用事例と手法

大井 友三

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社

ヘルスケア・ライフサイエンス ソリューション部 ソリューション・アーキテクト

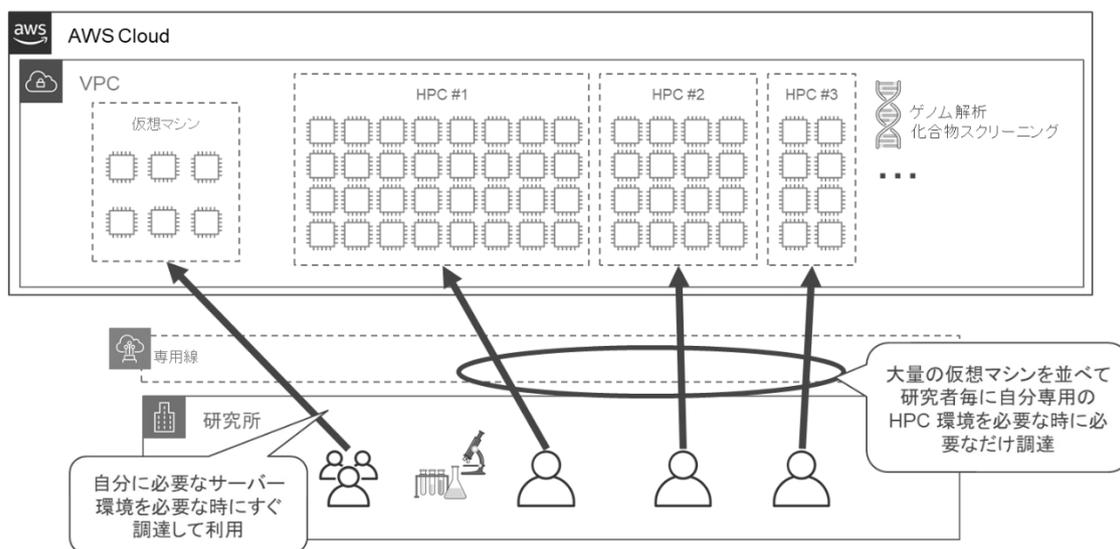
セッション2の要旨：

近年の in-silico 創薬研究では、企業内に眠る大量の化合物データをコンピュータでスクリーニングすることでリード化合物を発見したり、機械学習を用いてデータ分析を行ったりなどして創薬に生かされ始めている。しかしながら、自前で計算機環境を保持しながらも大規模な計算が必要な場合は限られた環境（CPU、メモリ、ストレージなど）を利用するため、①複数の研究者間でスケジュール調整をしたり順番待ちをしたりしながら利用する必要性や、②1つの計算に数週間～数か月要するなど、研究者の創薬研究の足かせになっているケースが出てきている。そこで、近年では計算機環境をクラウドに用意し、必要な時に必要な計算機環境を研究者が自由に利用できるようにすることで、これらの足かせを解放し、なおかつ具体的な創薬につながる事例も出始めている。

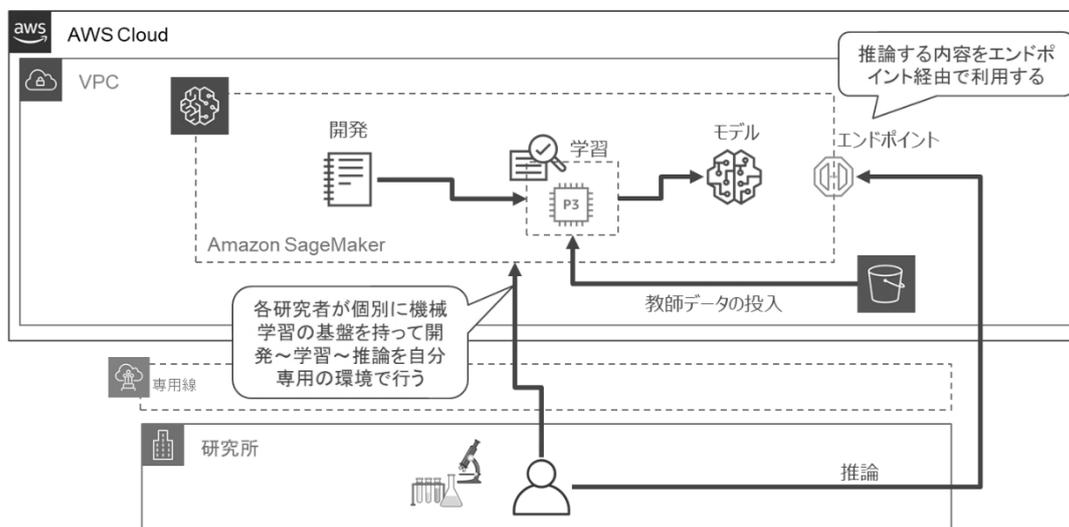
本セッションでは、クラウドを活用して具体的な創薬につなげた国内・海外の事例を基に、アマゾン・ウェブ・サービス（以下、AWS）のライフサイエンス分野への取り組みや、クラウドを創薬研究につなげるための具体的な手法について紹介していく。

In-silico 創薬での AWS の活用

必要な時に必要なだけの計算機環境を調達



Amazon SageMaker による機械学習ワークフローの構築



AWS を利用した HPC や機械学習のハンズオンについても随時開催予定です！

AWS ヘルスケア・ライフサイエンスのご紹介ページ：

<https://aws.amazon.com/jp/health/>

お問い合わせ先：<https://aws.amazon.com/jp/contact-us/>

