

## 創薬研究におけるクラウド活用の実際 ～第一三共でのデータ駆動型創薬化学研究基盤～

近年の創薬開発を取り巻く環境はモダリティの増加に伴い変化し続けており、人工知能 (AI) や機械学習をはじめとした最新技術の導入によりデータ駆動型創薬へのアプローチも増加している。これらは大規模なパブリックデータからのインサイトや化合物に関する立体構造予測等の取り組みによって創薬への活用拡大が期待されている。本セッションでは、Amazon Web Services (AWS) 上に構築された第一三共のデータ駆動型創薬化学研究基盤に関連する AWS サービスの概要に加え、第一三共研究統括部スマートリサーチ推進グループの国本様より、研究への活用状況や今後の発展性についてご紹介いただく。

### AWS サービスを活用した High Performance Computing (HPC) 環境の構築

中島 丈博

アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社 技術統括本部

データサイエンスにおける人工知能 (AI) の活用を実現するためには、これまでにはない実験的な試行を繰り返すことによって様々なアプローチを行うことが必要となり、これらを実現するためのプラットフォームとして、初期投資なく利用可能なクラウドコンピューティング環境に大きな期待が寄せられている。クラウド上には 200 を超える様々なサービスが提供されており、お客様がこれらを組み合わせて頂くことにより、それぞれの目的にそったスケーラブルな計算環境をフレキシブルに構築することが可能である。またこれらのクラウドの特性を活かしてすでに大規模なバーチャルスクリーニングや、ゲノム解析、クライオ電子顕微鏡単粒子解析等で活用されている。本セッションでは AWS の基本的な概要や、AWS 上に創薬研究基盤を構築する際に活用されるサービスとして、自動的に HPC クラスタを構築することが可能な AWS ParallelCluster や、高スループットな分散ファイルシステムである Lustre を AWS マネージドで提供する Amazon FSx for Lustre、化合物情報を格納するために必要となる rdkit extension がサポートされた Amazon Aurora PostgreSQL を紹介する。

# AWS サービスを活用したデータ駆動型の創薬化学研究基盤の構築

国本 亮

第一三共株式会社 研究統括部 スマートリサーチ推進グループ

近年、人工知能 (AI) やデータサイエンスが創薬研究に大きな影響を与え始めており、各社より成果が示されている。第一三共創薬化学研究所においても、これまでの研究フローに種々のデータサイエンス手法を取り入れる「データ駆動型創薬化学」を推進してきた。我々が志向するデータ駆動型創薬化学は、Medicinal Chemist が個人の直感や経験に基づいた意思決定を行うのではなく、アクセス可能な全ての情報を利用して、説明可能な化合物デザインと合成研究の最適化を目指している (図 1)。本目標を達成するには、複数のデータソースからデータを統合し、分析・可視化および予測モデリングによりシームレスに補完され、知識抽出と検証可能な仮説を生成する必要がある。また、これらの研究は一つのソフトウェアで完結することは困難であり、現状では複数のソフトウェアを状況に応じて使い分けている。本発表では、AWS を用いたデータ駆動型創薬化学を実現するためのプラットフォームについて紹介する。

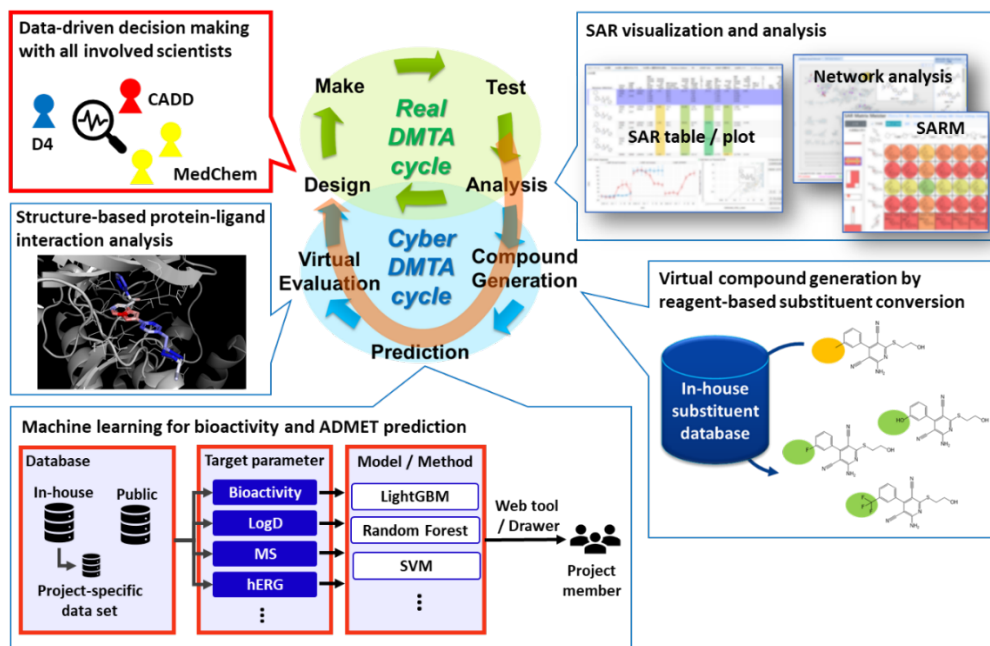


図 1. データ駆動型の化合物デザインのワークフロー (Kunimoto R et al, Drug Discov Today 27, 2065-2070, 2022. Figure 1(b)より引用)

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/local/health/>

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

