

2012年9月26日  
三井情報株式会社**MKI、スパコン「京」による創薬プロジェクトに参画**

～ コンピューター創薬プロジェクトへの参画により、国内の創薬力向上に貢献 ～

三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:齋藤 正記、以下:MKI)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ベンチャー企業との共同プロジェクト『バイオグリッド HPCI(※1)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。

**【 概要 】**

本年5月、一般財団法人 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、MKIが参加するコンピューター創薬プロジェクトが全62件の研究課題の1つとして採択されました。

当プロジェクトは、「京」を用い約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。従来の創薬現場では、候補物質の予測、洗い出しに時間を要していましたが、高性能かつ高信頼を追求した「京」による計算処理を用いることで化合物探索にかかっていた時間を大幅に短縮させ、新薬開発に役立てることが目的です。MKIは、主に立体構造に基づく医薬品候補化合物の探索と最適化の計算処理を担当し、京都大学及び産業技術総合研究所と連携し研究へ取り組みます。

また、当プロジェクトでは、研究を通じて得られたコンピューター創薬の技術と創薬研究の仕組みを製薬企業や研究機関が利用できるインフラ基盤とすることで国内の創薬医療向上へ取り組みます。MKIは、当プロジェクトを通じ新薬を必要とする多くの人々と社会にIT企業として貢献することを目指します。

**【 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、<br>(独)産業技術総合研究所   |
| ■ 製薬企業    | アスピフォーマ(株)、エーザイ(株)、小野薬品工業(株)、<br>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)、<br>田辺三菱製薬(株)、日本新薬(株) |
| ■ IT企業    | (株)京都コンステラ・テクノロジーズ、MKI   |

以 上

(※1)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提供する。

**【報道関係からのお問い合わせ先】**

三井情報株式会社 経営企画部 コーポレート・コミュニケーション室 TEL:03-6376-1008、e-mail:press@ml.mki.co.jp

### 【MKI、バイオインフォマティクス事業の歩み】

1975年にバイオサイエンスの研究開発に参画し、以来30年以上に渡り、MKIは先進的なIT技術をバイオサイエンスの研究に応用する取り組みを学術・研究機関と共に進めてまいりました。ポストゲノム時代を迎え、増加する膨大なデータを学術計算で効率よく処理すること、情報を可視化することは必須のものとなりました。MKIは、長年培ってきたバイオインフォマティクスに関する知識と経験に最先端のICT技術を組み合わせ、今後のバイオサイエンスの発展へ貢献してまいります。

### 【三井情報株式会社について】

三井情報株式会社(MKI)は、お客様のICT(Information and Communication Technology)基盤の構築・運用を通じて、お客様の情報コミュニケーションを支えています。ICTインフラストラクチャからアプリケーションにわたり、コンサルティングから設計・構築、運用・保守サポート、データセンターを活用したサービス等をワンストップでご提供します。MKIは、お客様の経営戦略や業務基盤をICTで総合的に支える「ICTトータルマネジメントパートナー」として、お客様とともに持続的な成長を実現してまいります。

ホームページ: <http://www.mki.co.jp/>

※三井情報、MKI及びロゴは三井情報株式会社の商標または登録商標です。

※本リリースに記載されているその他の社名・商品名は、各社の商標または登録商標です。