

# Undruggableに対する次の展開 「AI創薬」～Tokyo-1プロジェクト～



MITSUI & CO.

2023年6月10日

三井物産株式会社 デジタルサービス事業部 デジタルヘルスケア事業室

阿部 雄飛

三井物産株式会社  
ICT事業本部  
デジタルサービス事業部  
デジタルヘルスケア事業室

阿部 雄飛 (アベ ユウヒ)

[Yu.Abe@mitsui.com](mailto:Yu.Abe@mitsui.com)

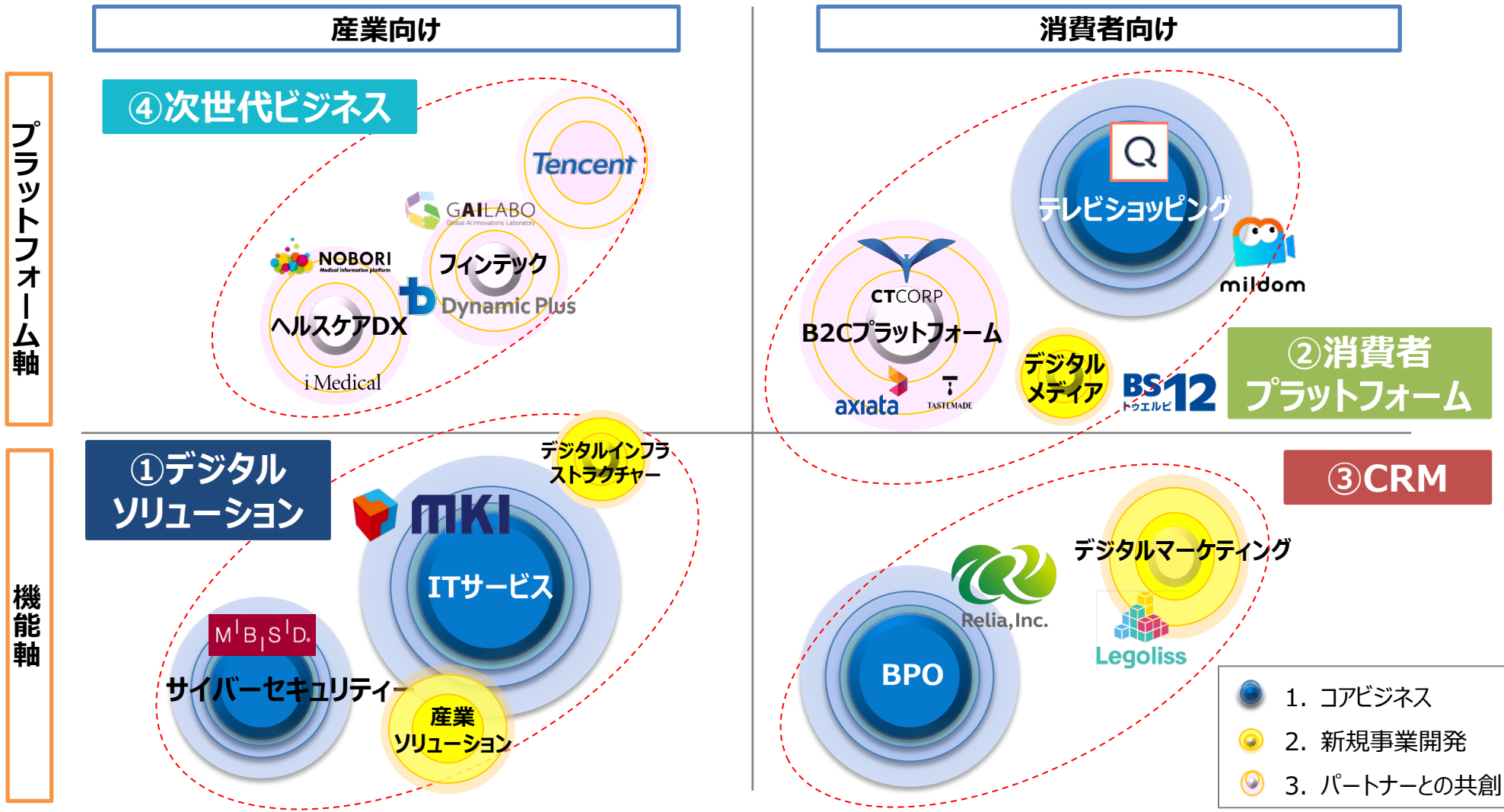


MITSUI & CO.

1. 弊社概要
2. グローバルのAI及びAI創薬の状況
3. 国内先進AI創薬プロジェクト「Tokyo-1」

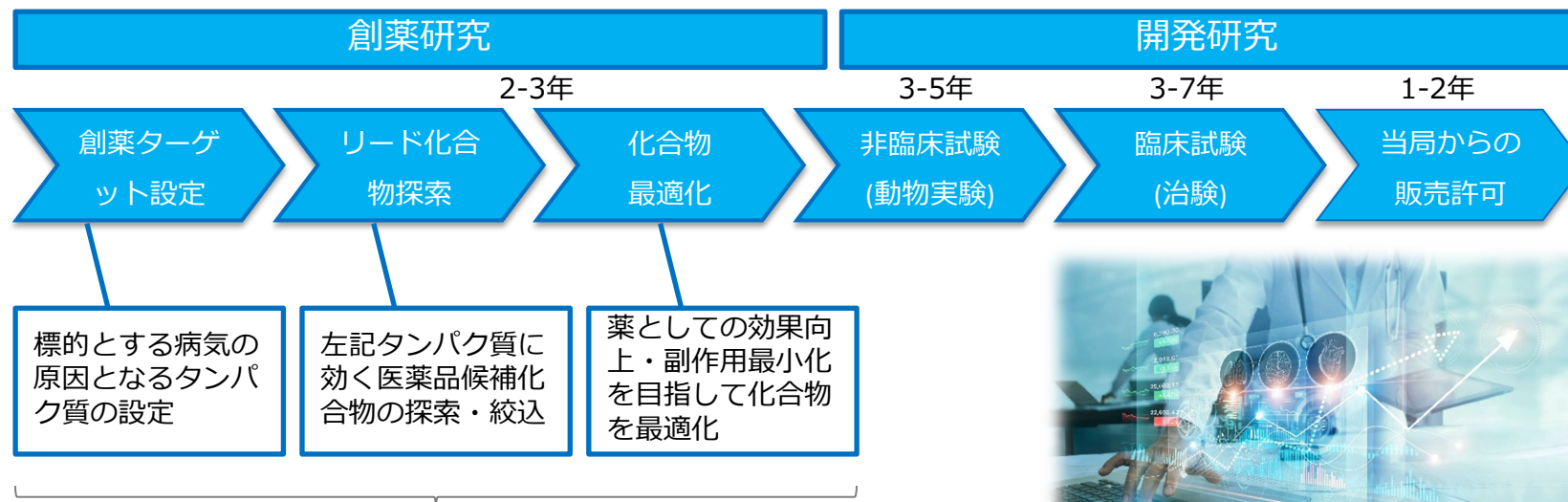
# 弊社概要

- あらゆる産業の中で、他の事業本部が有する場と、ICT事業本部が有するICT知見を掛け合わせながら、総合商社ならではの新たな付加価値・事業の創出を目指している。
- 「産業向け・消費者向け」、「プラットフォーム軸・機能軸」から事業ドメインを4象限に整理し、事業拡大に取り組み中。





- 会社名： 株式会社ゼウレカ
- 所在地： 東京都千代田区
- 設立： 2021年11月
- 株主： 当社100%
- 事業内容： AI創薬支援サービスの提供、共同研究による創薬を目的とした研究開発
- 従業員数： 12名 + 外部技術顧問2名 + 外部開発人員15名



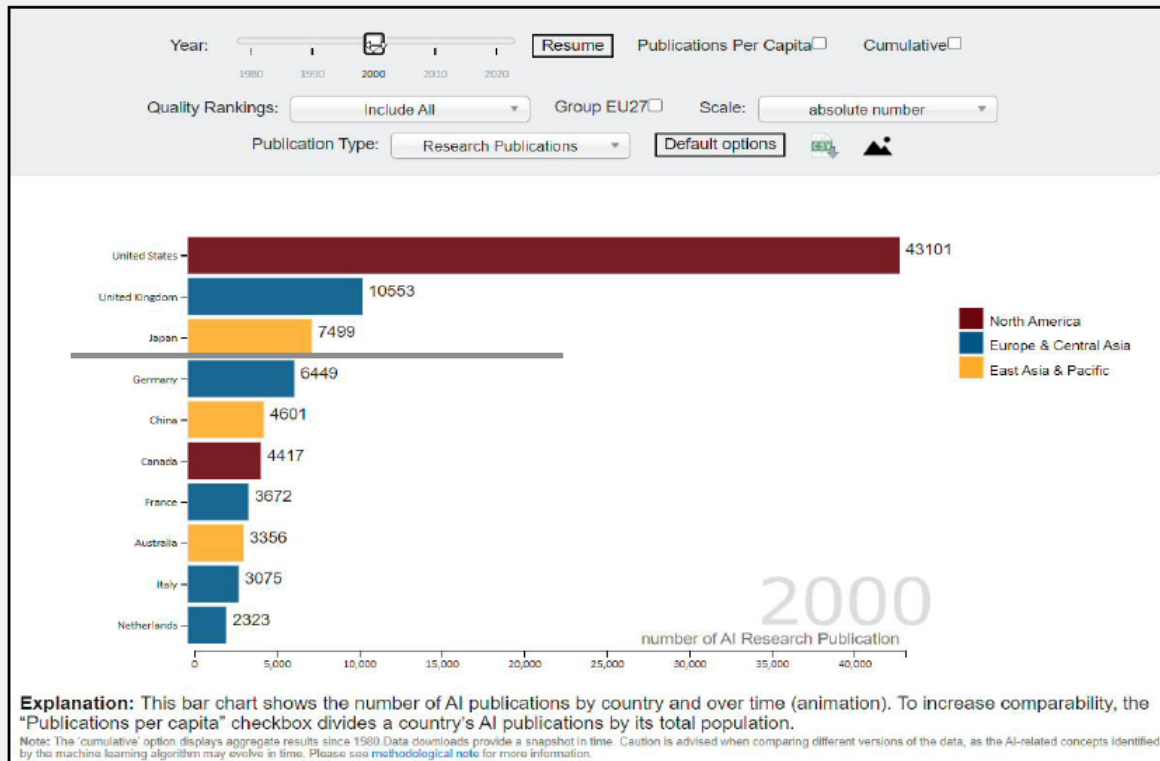
### ゼウレカのターゲット領域

Dryにより成功率改善及び時間=コスト削減への貢献を目指す

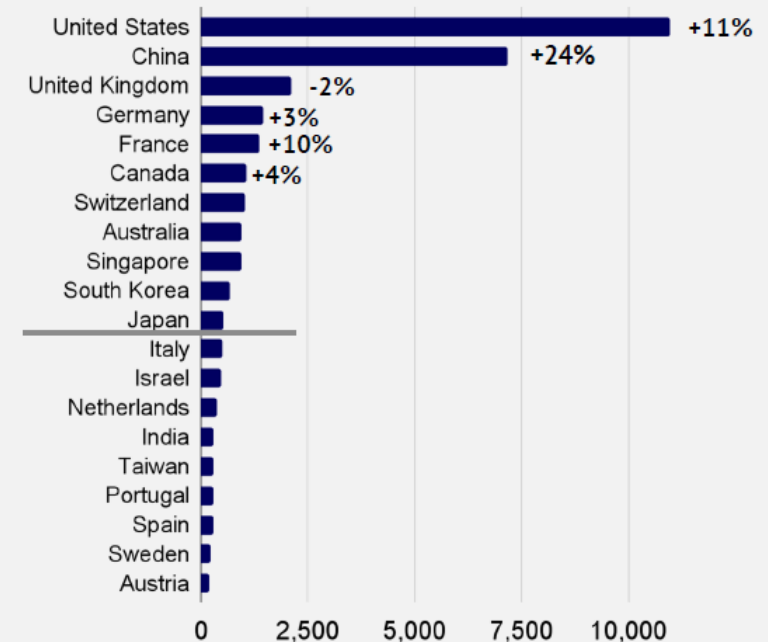
※Dry: コンピューター型創薬支援  
Wet: 実験型創薬支援

# グローバルのAI及びAI創薬の状況

# AI研究における日本の競争力は低下し続けている



## # papers published in 2022 and change vs. 2021



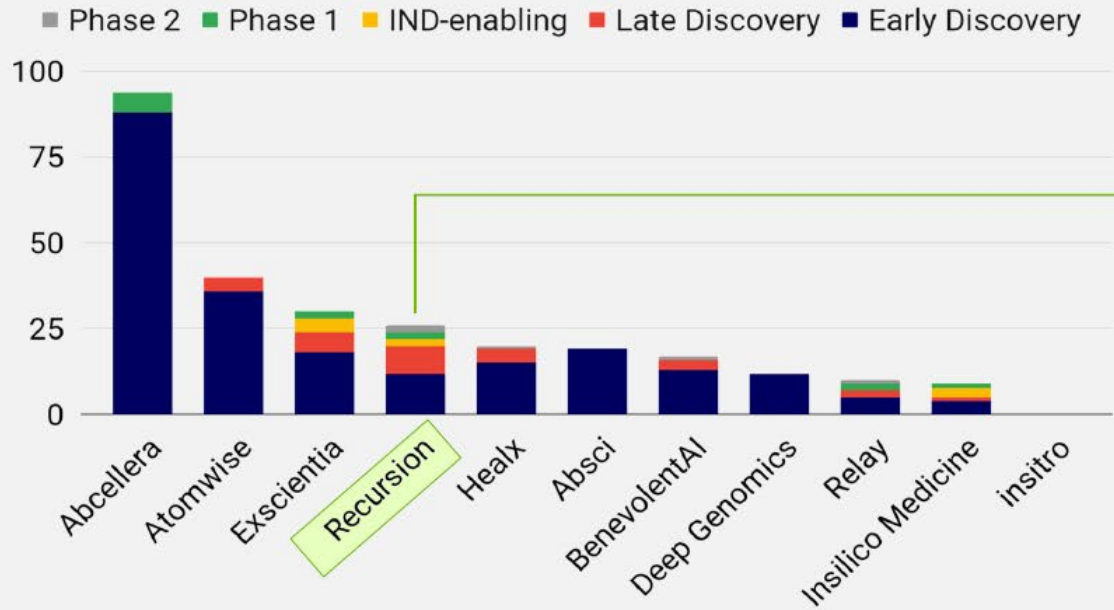
出典：  
 OECD.AI (2023), visualisations powered by JSI using data from MAG, version of 31/12/2021, accessed on 10/2/2023, www.oecd.ai.  
 stateof.ai 2022 (<https://www.stateof.ai>)





# AIドリブンな創薬によるパイプラインは少なくとも既に約20製品が臨床入り

ステージ別 開発パイプライン数 / 会社



BioHive-1 is built on NVIDIA's DGX SuperPod architecture and ranked 97th on the most recent TOP500 list of the world's most powerful supercomputers as of November 2021. This new computing power allows us to iterate on new neural network architectures faster and more efficiently, accelerating our deep learning models and empowering our growing workforce of ML experts. **Deep learning projects that took a week to run on our previous cluster can run in under a day on the new cluster.**

出典：  
 stateof.ai 2022 (<https://www.stateof.ai/>)  
 Recursion Pharmaceuticals documents (<https://www.sec.gov/Archives/edgar/data/1601830/000119312521089610/d89478ds1.htm>)



海外の先進製薬会社 ～40ノード

海外のAI創薬会社 ～40ノード

# 国内先進AI創薬プロジェクト 「Tokyo-1」

- 「Tokyo-1」は、創薬をデジタルで真剣に変革するイノベーションハブの形成を目指します。
- 変革に必要な、計算環境・ソリューション・コミュニティを包括的に提供致します。

① 最先端のGPUスパコン

## TOKYO-1 Innovation Hub



③ 最先端の  
情報コミュニティ

② 最先端の創薬  
DXソリューション

複数の製薬会社様と半年間かけて要件定義

## GPUスパコンの世界最先端モデル「NVIDIA DGX H100」

- **専有サーバー**

= 自分で**管理する必要の無い自由に利用できる自社専有**サーバ

- **共有バーストサーバー**

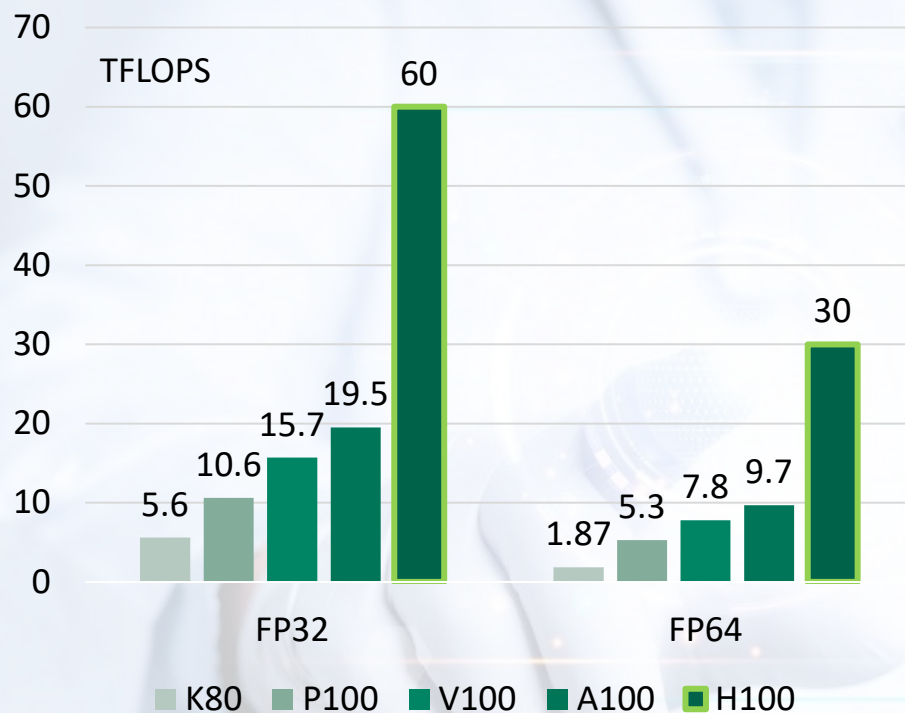
= コンピューティングリソースを**一時的により大規模・高速に**実施したいときに

### NVIDIA DGX H100仕様概要

GPU	8 x NVIDIA H100 TensorコアGPU
GPUメモリ	合計640GB
パフォーマンス	32petaFLOPS FP8
CPU	Dual x 86

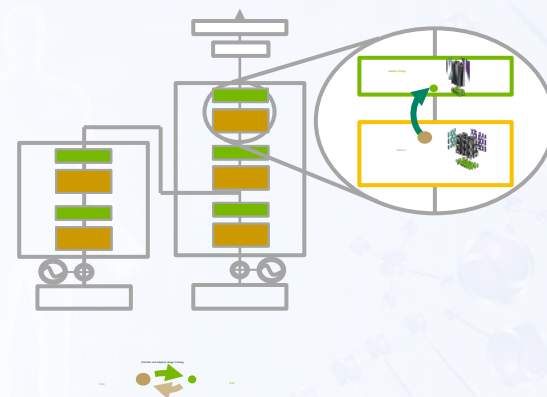


演算性能は3倍



さらに、トランスフォーマーエンジン搭載

A100よりも~6倍速い、トランスフォーマー\*の学習および推論を実現



\*近年の高い成績を収めているAIモデル（ChatGPT、AlphaFold2, ESM-2, ProtGPT2, BioBert、PubMedGPTなど）のほぼ全てがトランスフォーマーのアーキテクチャを採用している



## シミュレーションの大規模化

AFEP/RFEP, MD  
GPUドッキングなど

## AIによる大規模学習

大規模言語学習による生成モデル  
タンパク質構造予測モデル  
物性等各種予測モデルなど

## 画像解析

病理画像 (WSI)  
Single Cell画像など

## AIによる機器データの 高精度化

Cryo-EM, NGS, MSデータなど

**ゼウレカ+国内外の新興AI企業**

- **Tokyo-1メンバー間の意見交換・知見共有**  
→ **共同検証・共同開発等への発展**
- **海外での先進的な動き・事例等の共有、海外企業とのディスカッション**
- **AI・GPUエキスパートによるセミナー・ワークショップ**
- **国内外のAIソリューション企業紹介**



**2023年末**

**Tokyo-1サービスローンチ**

360° business innovation.



MITSUI & CO.