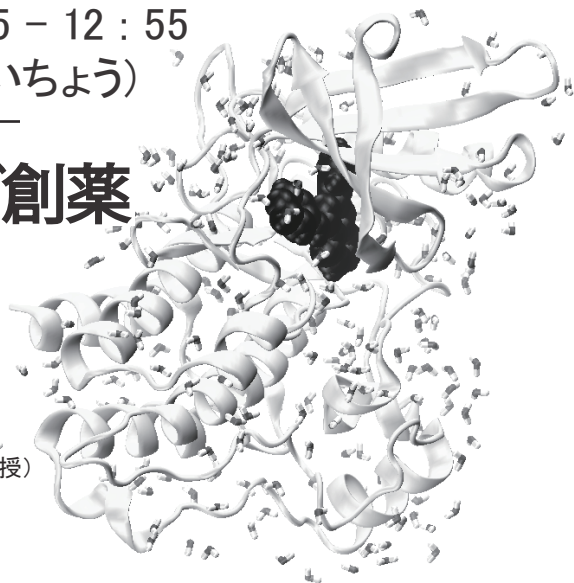


日時：2014年6月26日（木）11:55 - 12:55

会場：E会場（ワークピア横浜 3階 いちよう）

スーパーコンピューティング創薬 —これまでとこれから—



司会：木寺 詔紀

（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、
副プログラムディレクター / 横浜国立大学生命医科学研究科、教授）

演者 1：スーパーコンピュータ京を用いた
Dynamics based Drug Discovery

山崎 一人（大日本住友製薬株式会社 ゲノム科学研究所インシリコ創薬グループ、グループマネージャー）

従来の「鍵と鍵穴の関係」に基づく SBDD (Structure based Drug Discovery) は、標的蛋白質に対する薬物の活性強度や作動性（アゴニスト性やバイアス性）を予測するのが難しく、実験を代替できるレベルに至っていない。当社では、SBDD の限界を超えるべく、水や膜といった環境分子を含んだ系全体の熱力学に基づく DBDD (Dynamics based Drug Discovery) にシフトしており、その創薬展開にスーパーコンピュータの利用が不可欠な状況にある。結合活性の定量評価を中心とした創薬実用を「京の個別利用（有償・成果非公開）」にて、創薬への次期実用を想定した薬物作動性の予測手法確立を「京の実証利用（無償・成果公開）」にて取り組んでいる。これらは、単に現行の創薬プロセスを加速させるに留まらず、創薬プロセスの変革と次世代創薬への挑戦を可能にする。

演者 2：創薬における HPC の活用

田中 稔祐（武田薬品工業株式会社 化学研究所、リサーチマネージャー）

患者さんのもとへ一日でも早く優れた医薬品をお届けするのが製薬企業のミッションであるが、薬の開発には膨大な時間と費用が掛かるうえ、成功確率も極めて低いのが現状である。一方で、スパコン・京をはじめとして、コンピュータの処理能力は日進月歩、向上している。そこで、高性能な計算機（HPC）を利用した高精度な予測技術の確立によって、ウェットな実験に多くを頼っている医薬品候補化合物の最適化研究を効率化し、創薬における成功確率の向上とコスト削減を達成できると期待している。シミュレーションによる標的タンパク質への化合物の結合様式と活性の予測に関する最近の研究内容を中心に、効率的な薬づくりに向けた計算化学の活用を紹介したい。

演者 3：超大規模分子動力学計算による創薬の可能性：「形」と「動き」

山下 雄史（東京大学先端科学技術研究センター、特任准教授）

X線結晶構造解析が可能になり、タンパク質の形を原子レベルで見ながら薬の候補化合物を設計することが可能な時代になりました。しかし、設計した化合物が思い通りの性質を示さないことが多く、未だに多くの試行錯誤が必要です。我々は、結合自由エネルギーなどの物理量を高い精度で予測できれば、こうした試行錯誤を大幅に減らしていく事ができるのではないかと考え、全原子分子動力学シミュレーションを分子設計に活用する研究をしてきました。全原子分子動力学法はタンパク質だけではなく水分子も含め、原子の動きを再現していく方法で、大規模な計算資源が必要になります。実際、「京」の登場でこうした研究ができるようになりました。研究を進める中で、「形」だけではなく「動き」の情報も分子設計には重要なものであることが見えてきました。

