

2008年度 未踏IT人材発掘・育成事業

GPGPUを用いた薬物親和性評価プログラムの開発

山岸 純也(千葉大学 医学薬学府)

現在、医薬品開発においてコンピュータを用いるin silico創薬を利用する動きが高まっている。その中に何百万という化合物群の中から医薬品の種となりうる化合物を選別するスクリーニングソフトウェアがあるが、現在、計算時間や精度・費用面において解決しなくてはならない問題がある。

本プロジェクトではGPGPUを用いて全原子の力場計算を行うことでこれらの問題の解決を試み、配座探索・エネルギー極小化部でそれぞれCPUで計算を行うより約100倍程度の高速、かつ高精度のスクリーニングを行うことに成功した。既存のソフトウェアと比較すると1/10以下の計算時間であり、約1分で1化合物の結合様式、結合親和性の予測が出来る。この技術を用いれば高性能な並列クラスターを使わなくとも家庭用パソコンで実用レベルでのスクリーニングが実現でき、創薬環境を低コストで導入することが出来る。

またGPGPUを使うことで従来では計算速度の面で有り得なかった水分子を発生させたスクリーニングや、タンパク質の側鎖の自由度を取り入れたスクリーニングも容易になる。今後、更にin silico創薬の重要性が増していくことは間違いない。

