

hp120048: 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築



NPO法人バイオグリッドセンター関西 / 課題代表: 奥野恭史 (京都大学薬学研究科)

● 「京」による製薬業界のオープンイノベーション

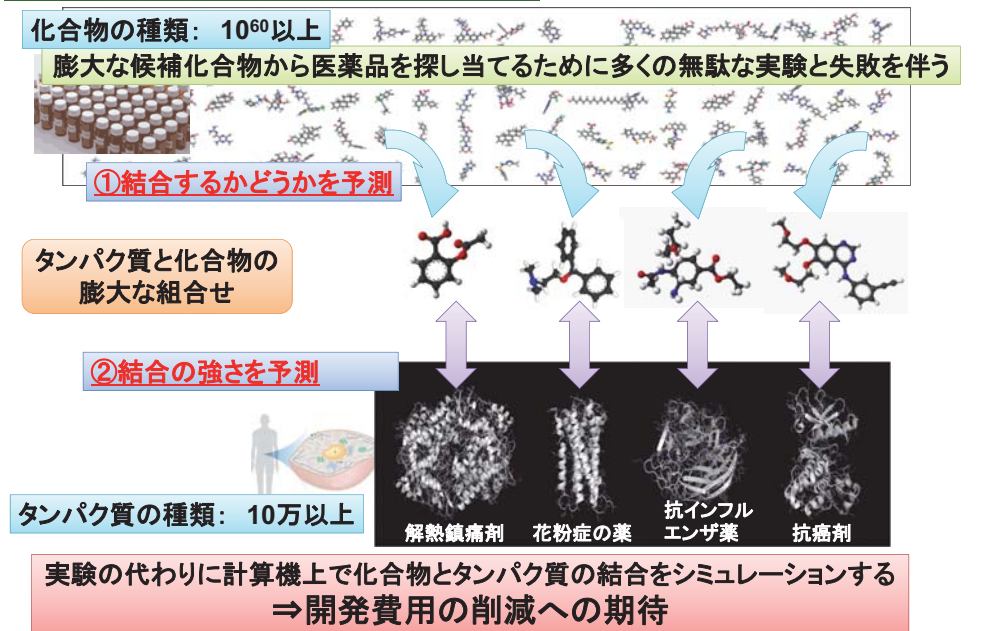
KBDDコンソーシアム: "K" supercomputer-based drug discovery consortium



申請主体(事務局): NPO法人バイオグリッドセンター関西
研究代表: 京都大学薬学研究科 奥野恭史
製薬企業(11社): アスピオファーマ, エーザイ, 小野薬品工業, キッセイ薬品工業, 参天製薬, 塩野義製薬, 大日本住友製薬, 田辺三菱製薬, 日本新薬, 科研製薬, 杏林製薬
IT企業(2社): (株)京都コンステラ・テクノロジーズ, 三井情報(株)
大学等: 京都大学薬学研究科, (独)産業技術総合研究所, 理研HPCI企画調整グループ, (公財)都市活力研究所

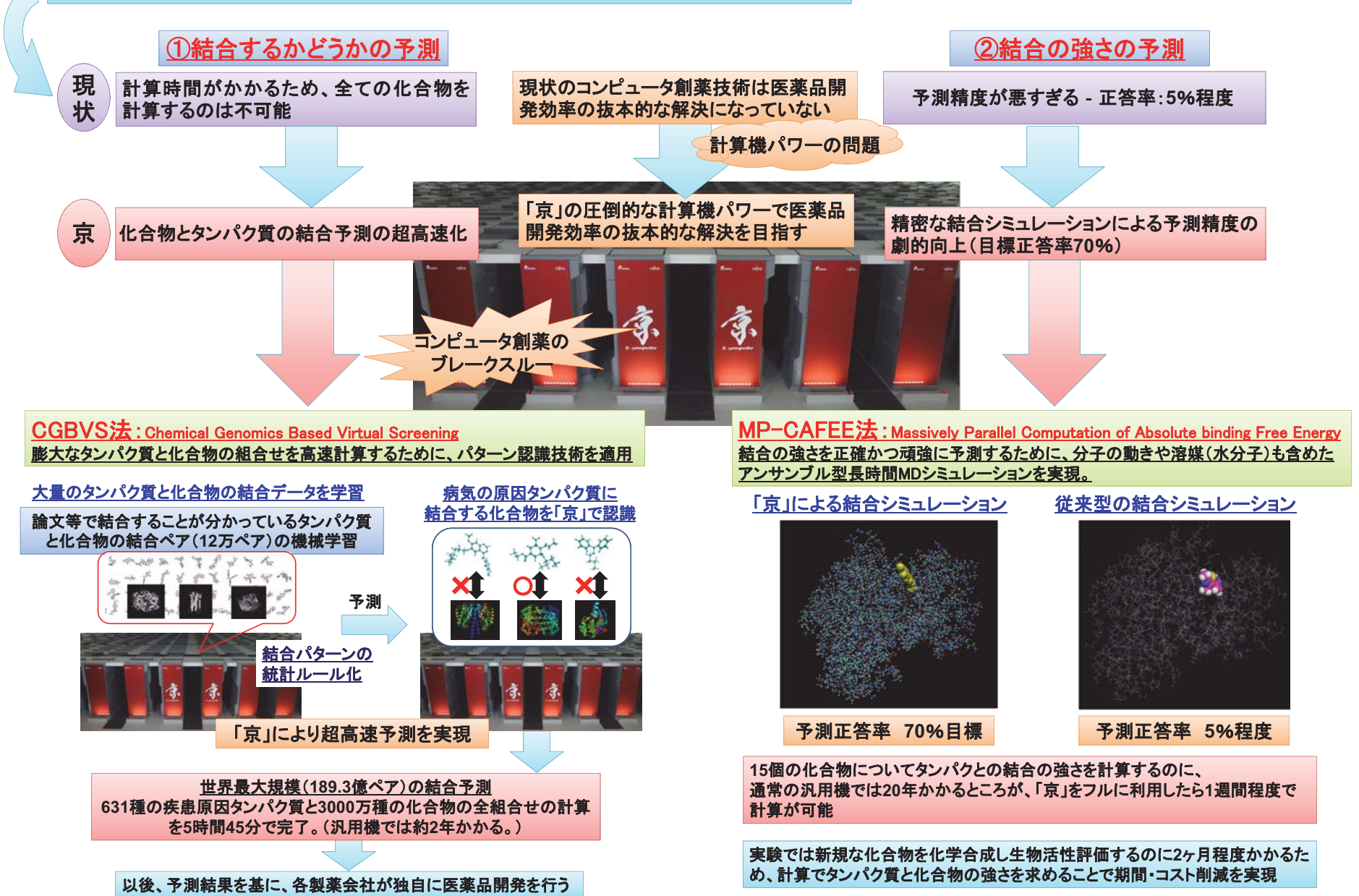
- コンピュータ創薬の根本課題に挑戦
- 製薬会社による現場利用に耐えうる計算フロー(計算精度と計算時間)の構築
- 我が国のコンピュータ創薬の中心拠点形成

● コンピュータ創薬への期待

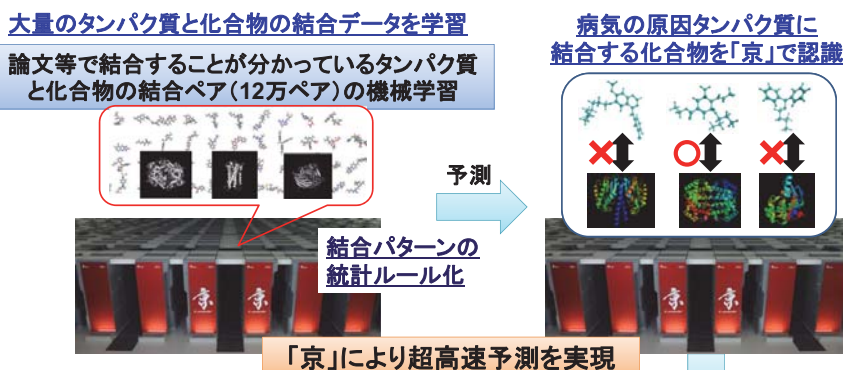


● 「京」による医薬品開発効率の抜本的解決

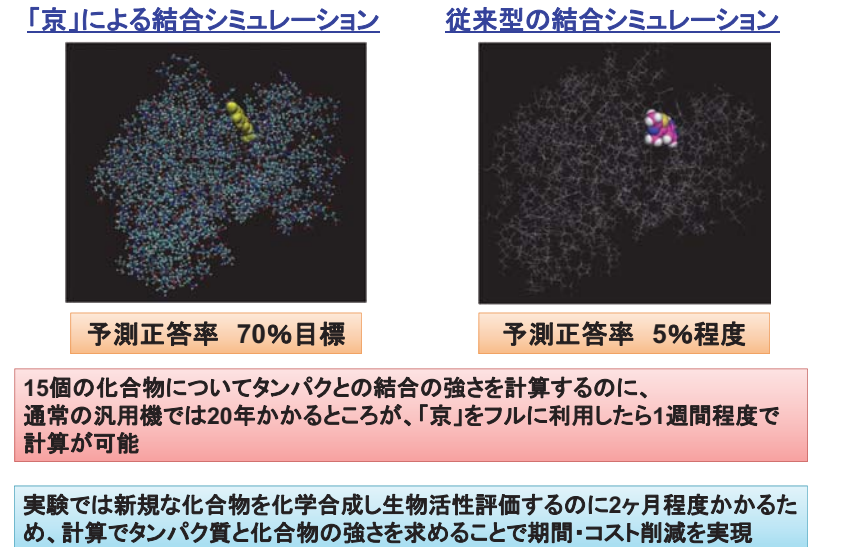
実験の代わりにコンピュータ上で結合をシミュレーションする ⇒ 開発費用の削減への期待



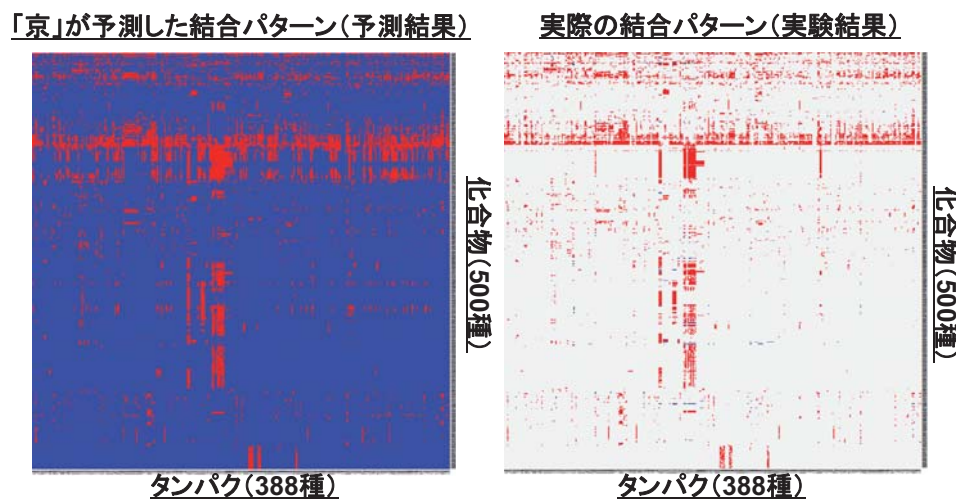
CGBVS法: Chemical Genomics Based Virtual Screening
 膨大なタンパク質と化合物の組合せを高速計算するために、パターン認識技術を適用



MP-CAFE法: Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy
 結合の強さを正確かつ頑強に予測するために、分子の動きや溶媒(水分子)も含めたアンサンブル型長時間MDシミュレーションを実現。



CGBVS法による予測と実験結果との比較



MP-CAFE法による予測と実験結果との比較

