

ポスト「京」で目指す次世代シミュレーション創薬

ポスト「京」により超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について機能阻害のみでなく機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現します。

薬の開発プロセスの効率化

超高速化による長時間シミュレーションにより、大規模な分子間相互作用を高精度に予測することが可能となることで、タンパク質と薬剤候補化合物の莫大な組み合わせや薬剤によるタンパク質の機能制御を理解しながらコンピュータ上で薬の候補分子をデザインすることができます。薬効が高く、副作用が少なくなるように行われていた実験がコンピュータシミュレーションに置き換わることで実験にかかっていた大きなコストと時間を削減することができます。

長時間の分子シミュレーション技術の開発

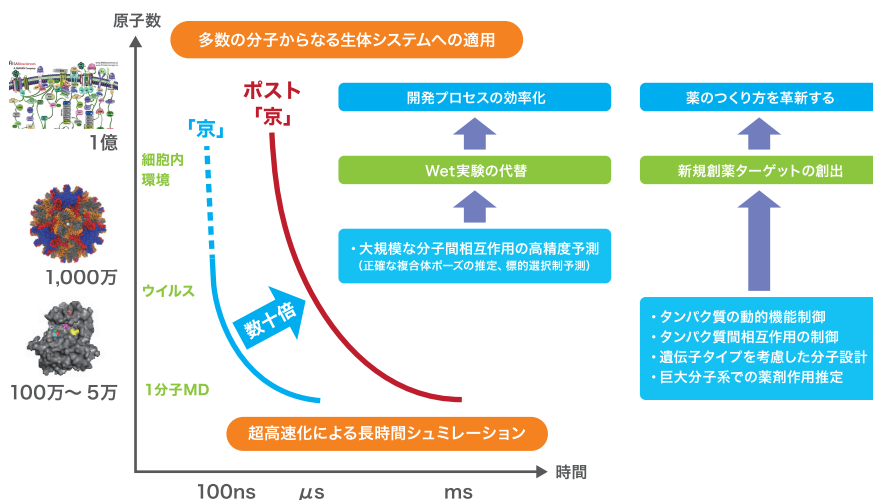
ポスト「京」の演算能力を最大限に活かすことが可能な MD ソフトウェアの開発と高速化により、「京」では数十マイクロ秒間の体の中の分子の動きしか計算できなかったのがポスト「京」ではミリ秒間の分子の動きが計算できるようになります。

大規模分子システムのシミュレーション技術の開発

分子動力学計算の超高速化により長時間の計算がポスト「京」によって可能になることで細胞内の環境を考慮したシミュレーションが実現します。単独のタンパク質のみとは異なる多種多様な生体分子が複雑に絡み合った細胞内環境のダイナミクスが明らかになります。

重点課題1のミッション

「京」からポスト「京」へ：ポスト「京」でできるようになること

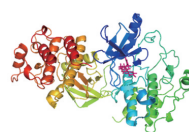
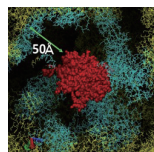
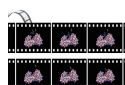


薬の作り方の革新

これまでのシミュレーションによる方法では薬効や副作用を予測することができなかったが、タンパク質間相互作用や複数の生体分子が複雑に絡みあった細胞環境を考慮した計算により、病気の原因分子と薬の候補物質の新しい働きや未知の作用が解明される可能性があります。さらに遺伝子タイプを考慮した分子設計によりオーダーメイド治療薬や治療が不十分な疾病の画期的新薬の開発に新たな道を拓きます。

ポスト「京」を用いた革新的創薬計算基盤の構築

ポスト「京」によって薬剤候補化合物の探索や分子デザインを高精度かつ超高速に実現する創薬ビッグデータ統合システムの開発を行うことで開発プロセスの効率が最適化され、開発コストや医療費の削減につながります。さらに創薬手法の開発も進みこれまで開発が困難であった新薬の創出や医薬品開発のスピードアップにもつながり患者への貢献が期待できます。



ポスト「京」でのコデザイン

生体分子の構造ダイナミクス

生体分子機能の理解

機能制御部位の同定

候補化合物デザイン

ポスト「京」を用いた超高速分子シミュレーション

生体分子システムの時間的空間的機能解析による次世代型創薬の開拓

ポスト「京」MDを機軸とした革新的創薬計算基盤の構築

