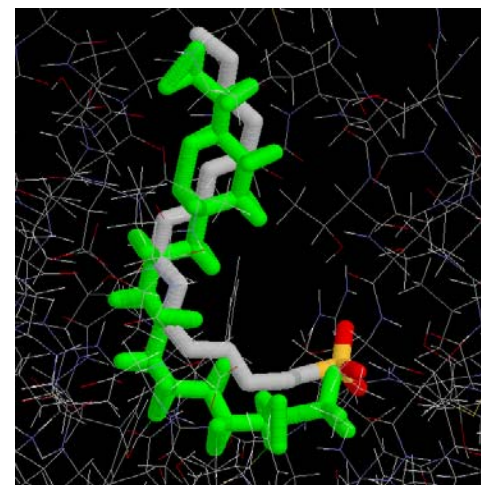


分野名: ライフ

# タンパク質・薬物ドッキングシミュレーション

- プログラム名: sievgene/myPresto
- 開発
  - 産業技術総合研究所・生物情報解析研究センター  
研究員 福西快文、JBiC他
  - 大阪大学蛋白質研究所 教授 中村春木
- 概要
  - 数百万の市販化合物を次々に医薬標的タンパク質に対してドッキングし、複合体構造とその結合エネルギーを予測することで、医薬品候補物質の探索を行う。
  - タンパク質と化合物の相互作用を疎水性相互作用やクーロン力などを表現する古典的力場で求める。
- アルゴリズム
  - タンパク質と化合物の複合体構造探索を、大局的探索は幾何学ハッシング法、局所探索は最急勾配法で行う(相互作用計算はグリッドポテンシャルを利用)。
  - Fortran90による逐次計算
- 現状での計算規模
  - グリッドポテンシャルの格子点数 60x60x60
  - 100 万化合物 x 100 標的タンパク質(逐次計算)
  - メモリ容量 0.2 GB(1ノード)、ディスク容量 0.5 TB
- 次世代スパコンでの計算規模
  - 1ドッキングあたり 30 倍(10-15%の精度向上)、ドッキング数(化合物数)を 100 倍、計 3000 倍
  - メモリ容量 1 TB、ディスク容量 50 TB



タンパク質受容体ポケットに結合する低分子リガンドの予測構造(緑色)と実験による構造(CPKカラー)

- どんなことが期待されるか？
  - 全市販化合物を対象とし、1000 種程度の代表的なタンパク質を扱うためには、100 倍の計算規模を要し、精度を 10-15 %向上するには1ドッキング当たり 30 倍の計算量が必要。
  - 計算されたデータは、標的タンパク質の 3 次元構造が既知の場合の医薬品探索から、膜タンパク質のように立体構造が未知の標的の場合の医薬品探索にも利用され、ランダムスクリーニング実験による医薬品探索よりも数十倍の効率をあげて、実験の効率化・開発時間短縮を行う。