

未来をひらく
スーパーコンピュータ

「京」からその先へ 限りなき挑戦

スーパーコンピュータが
新薬創出の扉を拓く！

山崎 一人 (やまざき かずと)

大日本住友製薬株式会社・ゲノム科学研究所
グループマネージャー

研究分野

インシリコ創薬
(シミュレーションおよびインフォマティクスによる創薬)

年々増加する医療費を背景に、すでに治療満足度の高い生活習慣病などにはジェネリック医薬品*が多用され、新薬の研究開発は癌を始めとする未だ治療の難しい病気を対象とします。創薬研究では、何 10 万、何 100 万という薬物候補の中から標的に強く作用する薬物を探し出します。従来は、病気との関連がすでに明らかな単一の蛋白質あるいはシグナル伝達（複数の蛋白質間における情報の受け渡し）を標的とするケースが多かったのに対し、現在は病気との関連が未だによくわからない複数の蛋白質あるいはシグナル伝達を標的とするケースが大半を占めます。その為、新薬の創出は以前にも増して難しくなり、コンピュータが実験の一部を担うことにより新薬創出のチャンスを広げることが、もはや避けては通れない状況にあります。

ところが、標的と薬物の相補性（鍵と鍵穴の関係）に基づく従来のコンピュータによる評価法は、標的蛋白質に薬物が結合し得るか否かを判断するのが精一杯で、実験を代替できるレベルとは言えませんでした。「京」の出現は、この状況を大きく変えつつあります。水や膜などの多数の分子に取り囲まれた標的や薬物の動的挙動を現実的な計算時間内にシミュレートできるようになり、薬物が標的蛋白質に対してどのくらい強く結合するかまでも、ある程度評価できるようになったのです。また、「京」を用いた計算手法の研究を進め、薬物結合後に誘発される標的蛋白質からのシグナル伝達の強さまでも計算機の中で評価できるようになりつつあります。こうしたコンピュータ上の創薬は、創薬研究を加速させ新薬創出のチャンスを広げるだけでなく、個別化医療や予防医療に対応した次世代の新薬創出にも大いに力を発揮するものと期待されます。

* 新薬の特許が切れてから発売される薬