

## 創薬専用 MD シミュレータ MDGRAPE-4A の開発と創薬応用に向けて Development of dedicated MD simulator MDGRAPE-4A and toward its application to drug discovery

### 開催趣旨:

日本製薬工業協会(製薬協)と理化学研究所(理研)は、創薬現場のニーズを踏まえた技術開発の促進が重要となることから、その第一段階として、「創薬専用 MD シミュレータの産学共同開発」をテーマとし、議論を進めております。

平成 29 年 2 月より 4 度開催した理研-製薬協連携フォーラムでは 20 社を超える参加を得て、理研にて開発中の MD シミュレータ「MDGRAPE-4A」について、開発状況や創薬利用の可能性や開発側・ユーザ側意見交換、および、活発な議論をいただきました。MDGRAPE-4A は本年 4 月にハードウェアが完成し、供用に向けて検証とソフトウェアの開発を進めています。

当日は、MDGRAPE-4A の現時点の性能の概要について紹介するとともに、今後の創薬応用について議論します。

モデレーター: **本間 光貴 Teruki Honma**  
理化学研究所 RIKEN

### 1. MDGRAPE-4A システムの概要と MDGRAPE-5 への展望

**泰地 真弘人 Makoto Taiji**  
理化学研究所 RIKEN

MDGRAPE-4A は、分子動力学専用計算機第 4 世代の改良版にあたります。MDGRAPE-3 までが非結合力計算専用アクセラレータ LSI という位置づけだったのに対し、MDGRAPE-4,4A は、分子動力学計算のすべての演算を実行する System on Chip (SoC) LSI の並列システムになるという大きなジャンプがありました。次世代の専用計算機に要求される特徴や仕様についても議論します。

### 2. MDGRAPE-4A システムの運用と性能評価

**森本 元太郎 Gentaro Morimoto**  
理化学研究所 RIKEN

今年 4 月に完成した MDGRAPE-4A システムを使い、いろいろなタンパク質を含むテスト系を計算しながら、ソフトウェアの機能追加、検証、デバッグ、およびユーザーインターフェースの改良を行ってきました。MDGRAPE-4A を使った計算の入出力データ、ユーザーインターフェースのデモンストレーションを行い、演算結果の精度と性能について報告します。

### 3. インシリコスクリーニング・活性予測の現状と MDGRAPE-4A への期待

**本間 光貴 Teruki Honma**  
理化学研究所 RIKEN

低分子創薬において、インシリコスクリーニングや活性予測の役割はなくてはならないものとなっているが、タンパク質の柔軟性など、依然として予測が難しいケースも多い。また、低分子だけではなく、中分子や抗体の設計においては、大規模なシミュレーションが欠かせない。本講演では、現状のインシリコ創薬の到達点と課題を概観したのち、MDGRAPE-4A による大規模シミュレーションが果たす将来の役割について、議論したい。