

1P08

DrugML と Grid 創薬

○浜田 道昭¹、稲垣 祐一郎¹、中馬 寛²

¹(株)富士総合研究所 (〒101-8443 東京都千代田区神田錦町 2-3)

²徳島大学 (〒770-8505 徳島市庄町 1-78)

我々のプロジェクト（「GRID テクノロジーを用いた創薬プラットフォームの構築」）では、GRID 計算環境を基盤とし、各種大規模分子科学計算及びデータベースを統合した創薬プラットフォームの構築を行っている (Fig. 1). このプラットフォーム実現のために、我々は各種アプリケーション間の共通のデータ構造を規定する、創薬向けマークアップ言語 DrugML (Drug Markup Language) の仕様を策定した. DrugML は CML (Chemical Markup Language) を拡張してつくられており、複数分子のスナップショットやその配座、様々な記述子、計算に関するメタな情報を表現することが可能である. さらに、DrugML をデータ構造として採用した、データベースの取替えを容易にする DB システムのフレームワークの開発し、その実装を C++言語及びネイティブ XML データベース Xindice を用いて行った (Fig.2). 今回はこれらに加え、GridRPC システム「OmniRPC」およびバーチャルスクリーニングソフトウェア「薬師」を用いて行った、Grid 環境上での Docking シミュレーションの結果についても報告したい (Fig. 3).

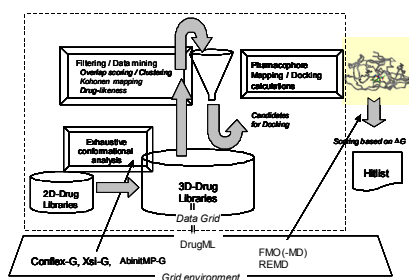


Fig. 1. platform for drug discovery

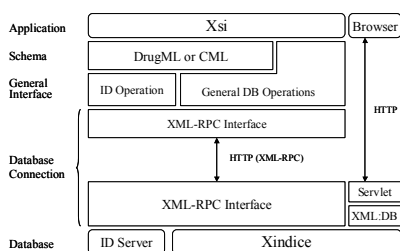


Fig. 2. Architecture of DB system

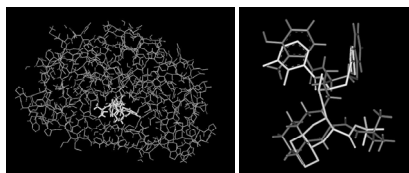


Fig. 3. (Right figure) Comparison of viracept of computation (white line) and X-ray (gray line). RMSD of two conformations is 1.77 Å. (Left figure) Complex of HIV protease of X-ray (gray line) and the calculated viracept (white line).