



ポスト「京」
重点課題2
個別化・予防医療を支援
する統合計算生命科学

文部科学省 ポスト「京」開発事業
重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発

カテゴリ「健康長寿社会の実現」

ポスト「京」 重点課題 2

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

Integrated Computational Life Science to Support Personalized and Preventive Medicine

その予防・医療、時代遅れです
—ポスト「京」の必要な訳—

実施代表機関 東京大学医科学研究所

ポスト「京」重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

文部科学省が推進する『ポスト「京」開発事業』のもと、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題（9つの重点課題）のひとつである重点課題2「個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学」（代表機関：東京大学医科学研究所）では、ポスト「京」稼働に向けて計算生命科学の分野におけるアプリケーション開発を行い成果創出に取り組んでいます。

ポスト「京」によって初めて実現できる「情報の技術」、「物理の原理の応用」、そして「ビッグデータの活用」により、環境・生体時空間的にゲノムから全身を捉え、加齢などとともに生じるがん、循環器系、神経系など、全身の疾患に対して、その病態の理解と効果的な治療の探索法の研究を行い、その成果を個別化・予防医療へ返す支援基盤となる統合計算生命科学を確立することを目的としています。

医療が変わる。未来を変える。統合計算生命科学。

ポスト「京」開発事業

文部科学省が科学技術の振興、産業競争力の強化、国際貢献、安全・安心の国づくり等の実現をめざし2014年度から推進している事業。世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの開発を行っています。

(1) スーパーコンピュータ「京」の後継機であるポスト「京」の開発・整備（開発主体：理研計算科学研究機構）

(2) ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）に向けたアプリケーション開発

健康長寿、防災・環境、エネルギー、ものづくり分野等から選定された課題のアプリケーションを開発。重点的な応用分野の明確化として、また国家的に取り組むべき社会的・科学的課題として9つの重点課題、そして新たに取り組むべきチャレンジングな課題である四つの萌芽的課題が設定されています。

ポスト「京」の重点課題（9課題）



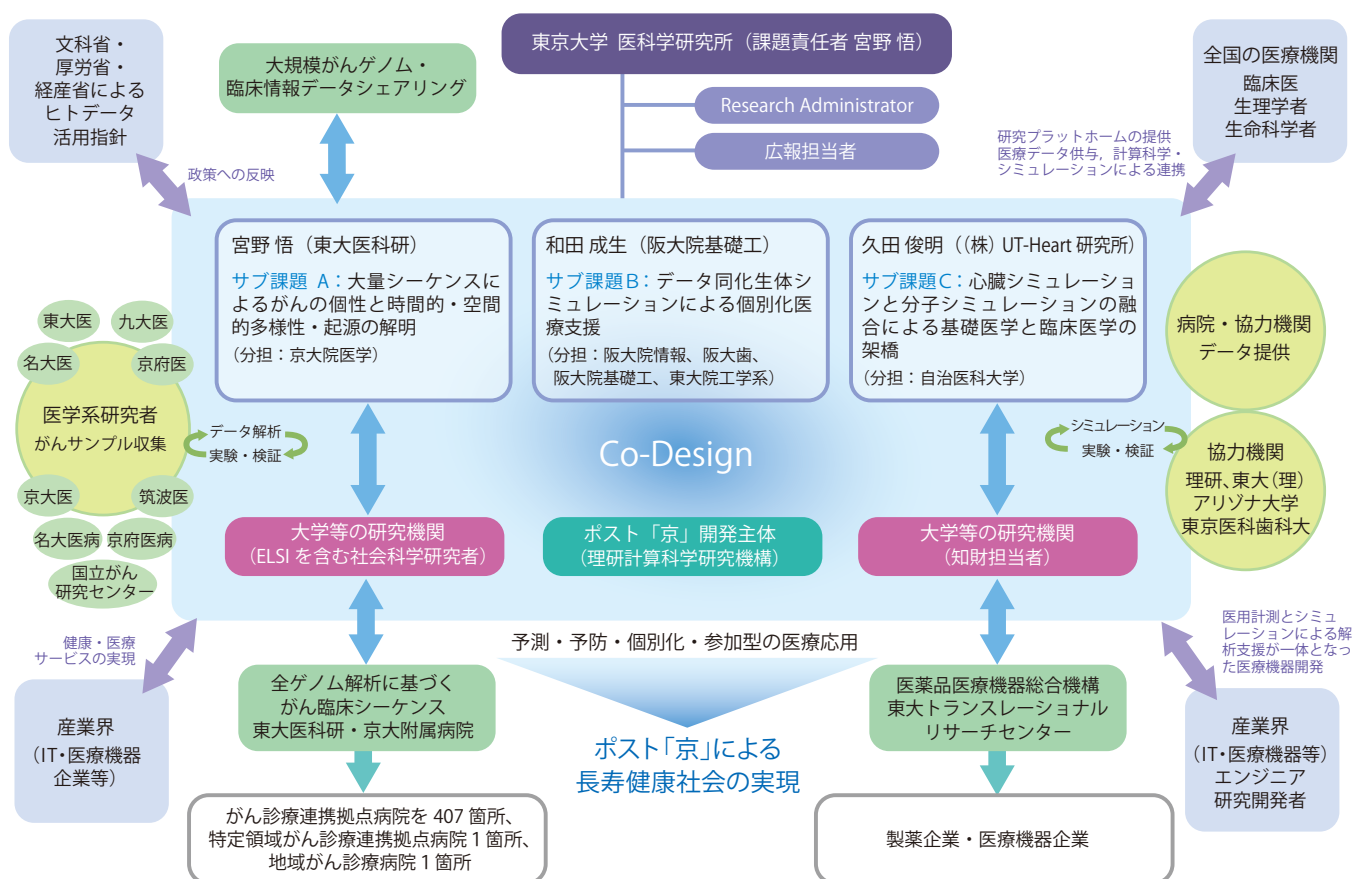
研究開発体制

国立大学法人東京大学を中核機関として、分担機関である国立大学法人大阪大学、株式会社 UT-Heart 研究所、国立大学法人京都大学、学校法人自治医科大学と密接に連携し、研究開発を実施しています。また、研究の進展に応じて多数の協力機関と連携しています。

サブ課題A「大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明」では、ライフサイエンスにおいてかつてない規模の大規模データを解析します。

サブ課題B「データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援」では、高度の生体階層統合シミュレーションに個体データを同化させる技術を開発しています。

この大規模データに基づくアプローチと並行して、サブ課題C「心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋」では、分子細胞レベルの研究と臓器個体レベルの研究を融合させ、ミクロとマクロのメカニクスとを関連させて定量的にとらえたシミュレーションモデルの研究開発を行っています。



2018年4月1日現在

Message



ポスト「京」重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

課題代表者

宮野 悟

Satoru Miyano

伝統的な医学・生命科学は、分子から臓器・全身レベル、家族、集団、種、生命層のデータを計測し、それに基づいた膨大な科学的知見と経験知を積み重ねてきました。なかでも、ヒトゲノム計画によりヒトゲノムの全貌が見え、その後、個々人のゲノムレベルでの違いが科学的に明らかにされたことは、人類の科学の歴史におけるマイルストーンといえるでしょう。一方、日本では、2008年より「次世代スパコン」、後のスーパーコンピュータ「京」のプロジェクトが開始され、生命体の統合シミュレーションというチャレンジが始まりました。その結果、多くの分野で画期的な成果が得られました。同時に、「京」で初めて見えてきた人類が越えねばならない壁が明らかになり、ビッグデータの登場と共に、ポスト「京」の開発とその活用が、国家として取り組むべき不可欠の課題となりました。

超高齢社会の世界の最先端をまっしぐらに進む日本。統計的に寿命は延びましたが、健康寿命とのギャップは10年近くあるという現実と直面しています。加齢と共にゲノムに蓄積した変異が原因となるがんや、分子レベルから疾患レベルまでの理解が計測データだけでは困難な循環器などの疾患に対してどのように取り組むか社会的国家的に重要な課題になっています。

例えば、がんは、進化する複雑なゲノム異常データとの勝負です。ポスト「京」とビッグデータで、個々人に対する確ながんの個別化予防・治療戦略を創出することが喫緊の課題です。個々人のがんの起源とその多様性を捉え、がん治療戦略、がんの予防法と超早期発見にイノベーションを起こし、副作用に優しく個人ごとに効き目のよい薬を創出する戦略をつくります。心疾患は、生体分子から心機能に至る病態の一貫理解が勝負です。ポスト「京」での心臓シミュレーションで心臓疾患の創薬・治療の中心的戦略技術を創出することが強く期待されています。

米国では“Cancer Moonshot”(アポロ計画の月面着陸になぞらえた、予算10億ドルのがん撲滅プロジェクト)[1]や“Precision Medicine Initiatives”[2]が進められています。また、英国では、バイオメディカル研究のために、数学や物理学の基礎をもつ研究者が半分以上からなる“The Francis Crick Institute”[3]が1,250人の研究者(スタッフは1,500人)、年間予算1.3億ポンドで始まろうとしています。本重点課題2は、コデザインによるポスト「京」の登場に希望をつなぎ、統合計算生命科学を展開します。

[1] <https://www.whitehouse.gov/the-press-office/2016/02/01/fact-sheet-investing-national-cancer-moonshot>

[2] <https://www.whitehouse.gov/precision-medicine>

[3] <https://www.crick.ac.uk/>

研究開発

大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明

Study of characteristics, temporal-spatial diversity and origin of cancer by large-scale sequencing

がんの個別化医療・予防の実現のためには、個々人のがんの相違、1つのがんの内部での多様性・起源を、全ゲノムシーケンス、RNA シーケンス、メチル化シーケンス、単一細胞シーケンス、さらには^{けっしょう}血漿をソースとしたDNA シーケンスから得られる大量シーケンスデータ解析を用いて明らかにする必要があります。本サブ課題では、現実のがん試料のデータに即して、スーパーコンピュータ「京」、及びポスト「京」の特段の計算能力を駆使することにより、こうした超大規模データ解析に必要となる現実的な計算機ソリューションを提供することにより、シーケンスに基づいた個別化・予防医療の実現を強力に支援するための統合計算生命科学を創設します。大規模データ解析、システム統合解析、ソフトウェア開発、がん発生進化シミュレーションを実施します。



サブ課題 A 責任者

宮野 悟

東京大学医科学研究所

Satoru Miyano

The Institute of Medical Science, The Univ. of Tokyo



サブ課題 A 分担責任者

小川 誠司

京都大学大学院医学研究科

Seiji Ogawa

Graduate School of Medicine Kyoto University



データ解析のプロセスを高精度、高効率に行うための
データ解析パイプライン「Genomon (ゲノモン)」の公式キャラクター

キャラクターデザイン：辻田幸広

研究開発

データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援

Supporting personalized medicine by data assimilation based biomedical simulation

本サブ課題では、ポスト「京」による大規模シミュレーションと生体計測で得られる情報を同化・融合させることにより、実測データを重視してきた医療にも受け入れられる計算機シミュレータの開発を目指します。これまでに、生命維持に必要不可欠な血液循環系と、高齢化社会におけるQOL(Quality of life)の維持に欠かせない身体運動機能を担う神経—筋骨格系および発話機能を担う口腔系に対して、個々の患者の診断や治療に必要な物理情報を提供するシミュレータの開発を行ってきました。今後はその中核となる全脳循環代謝シミュレータの開発を進め、大規模計算科学に立脚した新しい個別化医療支援技術確立していきます。

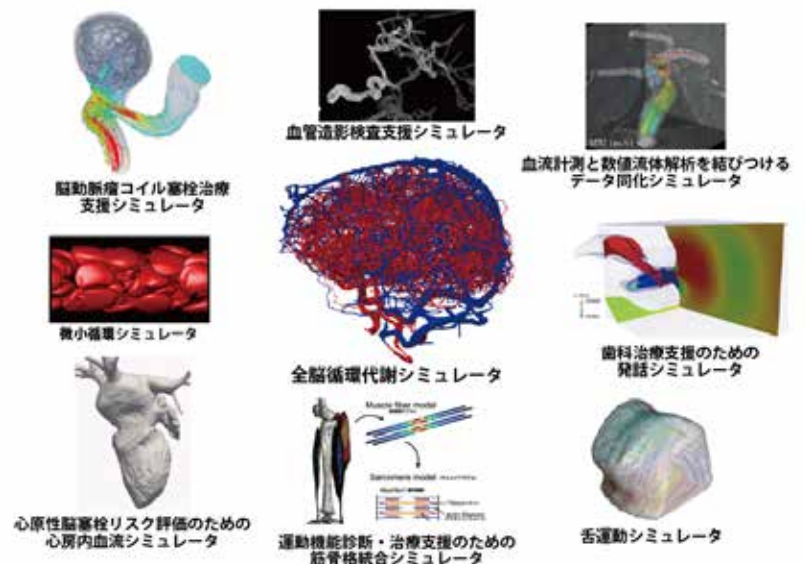
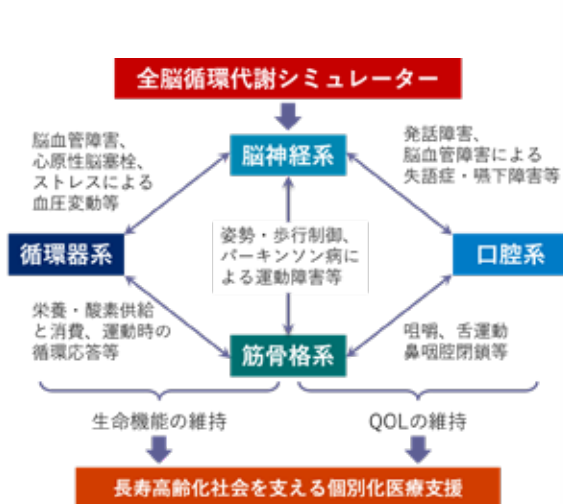


サブ課題B 責任者
和田 成生
大阪大学大学院基礎工学研究科

Shigeo Wada
Graduate School of Engineering Science,
Osaka University



サブ課題B 分担責任者
高木 周
東京大学大学院工学系研究科
Shu Takagi
School of Engineering, The Univ. of Tokyo



サブ課題B内のテーマの関連性

生体シミュレータの開発

研究開発

心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による 基礎医学と臨床医学の架橋

Bridging basic medicine and clinical medicine by fusing heart simulation and molecular simulation

これまでの UT-Heart の開発では、心筋細胞内の収縮機構の単位であるサルコメアを構成するミクロな収縮タンパクのダイナミクスからマクロな心臓の拍動までを繋ぐマルチスケールシミュレーション技術を完成しました。

ポスト「京」においてはこれを更に発展させ、粗視化した分子シミュレーションモデルから構成されるサルコメアモデルを開発し心臓モデルと連成させます。これにより、例えばマクロレベルで観察・測定される負荷がどのように分子レベルに伝達され細胞内信号伝達系を活性化するか、その結果どのような病態が引き起こされるかに関するメカニズム解明に切り込むことができると考えられます。一方、収縮タンパクの運動を調節するカルシウムイオン電流や、不整脈に関係の深いカリウム電流など各種イオン電流の細胞への出入りを制御するイオンチャネルについても分子シミュレーションモデルから構築し、薬剤との結合・解離のシミュレーションを行うことで、薬剤が心臓にもたらす副作用を評価します。



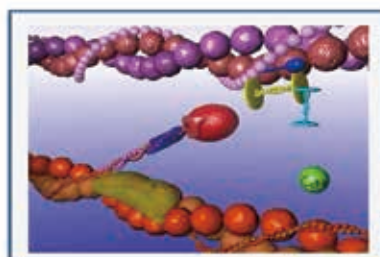
サブ課題 C 責任者
久田 敏明
株式会社 UT-Heart 研究所

Toshiaki Hisada
UT-Heart Inc.



サブ課題 C 分担責任者
永井 良三
自治医科大学大学院医学研究科
Ryozo Nagai
Jichi Medical University Graduate School of Medicine

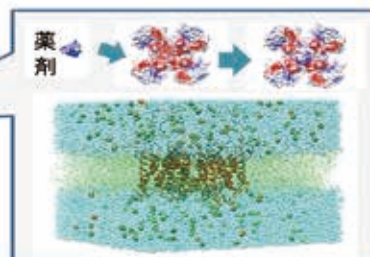
サルコメア内の分子モデルをアミノ酸レベルの分解能で作成。分子レベルの異常と心臓のマクロなポンプ機能をマルチスケールシミュレーション技術で結び付けることにより、心不全で報告されている分子の構造変化と病態の関係を解明し新たな治療法に繋げる。



京都大学・高田彰二 CafeMol
サルコメア分子モデル



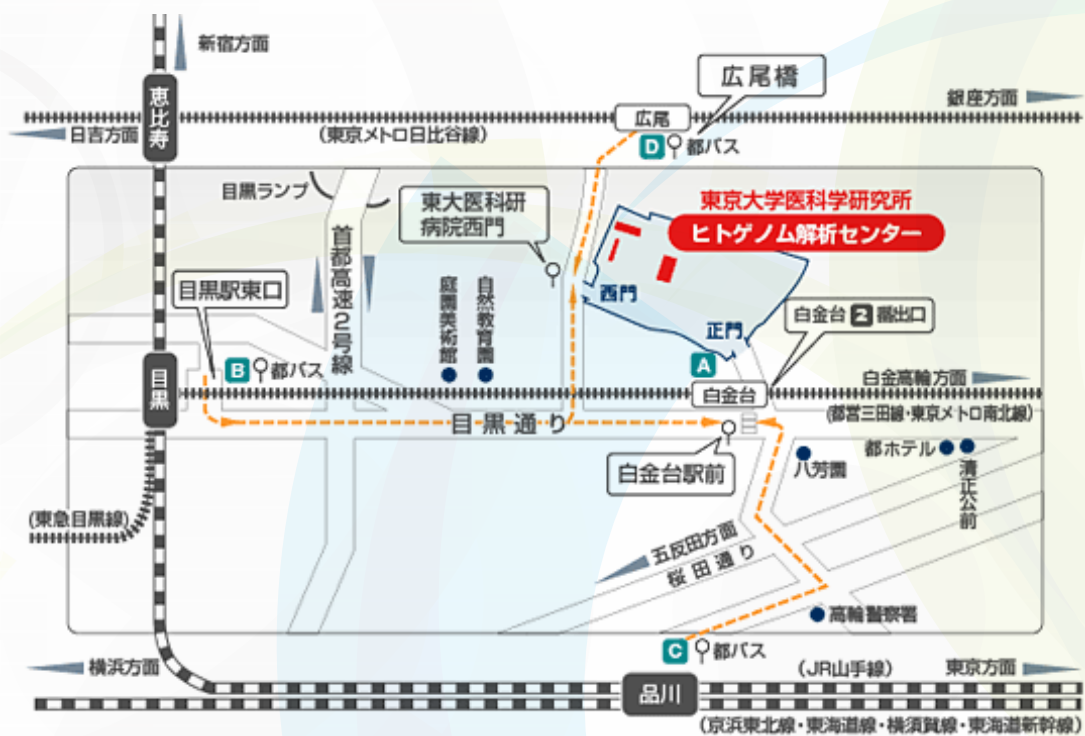
不整脈に関する主要なイオンチャネルは4~6種。分子シミュレーションに基づき開閉の遷移確率を定めた細胞モデルを実装したUT-Heartと薬剤ごとの結合・解離の分子シミュレーションを組み合わせることで機構化合物の心臓への副作用を予測する。



東京大学・寺田 透 μ2lib
イオンチャネル分子モデル

研究構想

■ アクセスマップ



ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発
重点課題 2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 事務局

〒108-8639 東京都港区白金台 4-6-1

東京大学医科学研究所 ヒトゲノム解析センター DNA 情報解析分野

TEL: 03-5449-5615 FAX: 03-5449-5442

E-mail: icls-office@hgc.jp

<http://postk.hgc.jp/>

