

ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」) 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

Vol. 20

NEWS LETTER

Contents

・ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」) 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」の5年間を振り返る

重点課題2、5年間の飛翔の先

・ Final Research Report

Subtheme A: 人馬一体の研究

Subtheme B: コンピュータシミュレーションで医療を支援する

Subtheme 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

・ Information

お知らせやイベント情報

INTEGRATED
COMPUTATIONAL
LIFE
SCIENCE
TO SUPPORT
PERSONALIZED AND
PREVENTIVE MEDICINE



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



ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」) 重点課題 2 「個別化・予防医療を支援する統合計算生命化学」の 5 年間を振り返る

重点課題 2、5 年間の飛翔の先

重点課題 2 課題責任者 東京大学医科学研究所 宮野 悟

病気は、臓器群の変調という現象として現れますが、その背景には生命の設計図ともよばれるゲノムがあり、オミクスとよばれるエピゲノム、RNA、タンパク質など多彩な分子が細胞を制御・構成しています。また、細胞には環境や加齢により長い時間をかけて変化していく各々人で異なる文脈があり、そのもとで構成されている臓器の状態も多様です。その繋がり複雑さは人智をこえています。その理解の端緒を開くためには、画像や生理データなどを含む高精度臨床データとともに環境・生体時空間的にゲノムから全身を捉える必要があり、計算科学との融合が鍵と考えていました。この 5 年間にゲノム解析技術は進歩し、ヒトゲノムのコストは 1000 ドルから 500 ドルほどにまで下がりました。また、高精度計測機器も発展し、超高解像度で生体をとらえられるようになりました。

重点課題 2「個別化・予防医療を支援する統合計算生命化学」は、こうした発展を見越して、ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」)によって初めて実現できる技術を開発してきました。

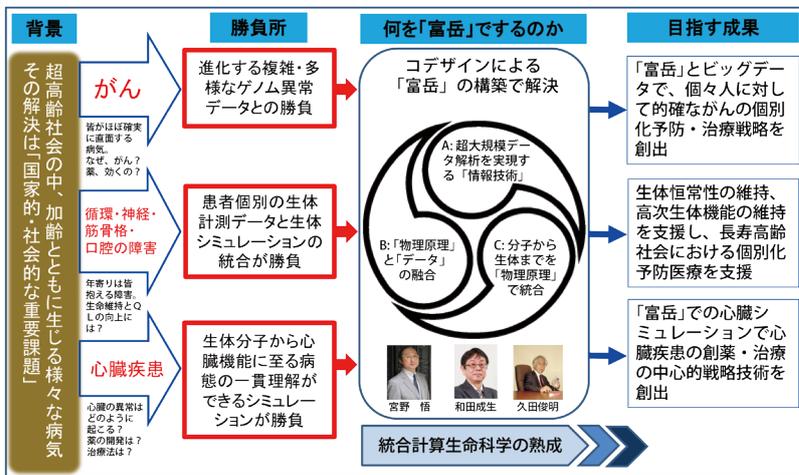


図1: 重点課題2の成果創出に向けた戦略

超高齢社会が抱える病気の代表は、がん、脳血管障害、心疾患です。私達のアプローチは、超大規模ゲノムデータ解析を実現する情報技術、物理原理とデータを融合したシミュレーション、分子から生体までを物理原理で統合したシミュレーションの三つ巴になっています(図1)。2015年にサブ課題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(宮野悟)」、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(和田成生)」、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(久田俊明)」から構成されるチームが生まれました。そして、この5年間に世界に類のない成果を創出することができました(図2)。世界をリードする形でこうした成果を創出することができたのは、「京」というスーパーコンピュータ、そしてコードデザインによる「富岳」の開発プロジェクトがあったからにほかなりません。文部科学省の戦略は極めて的確でした。

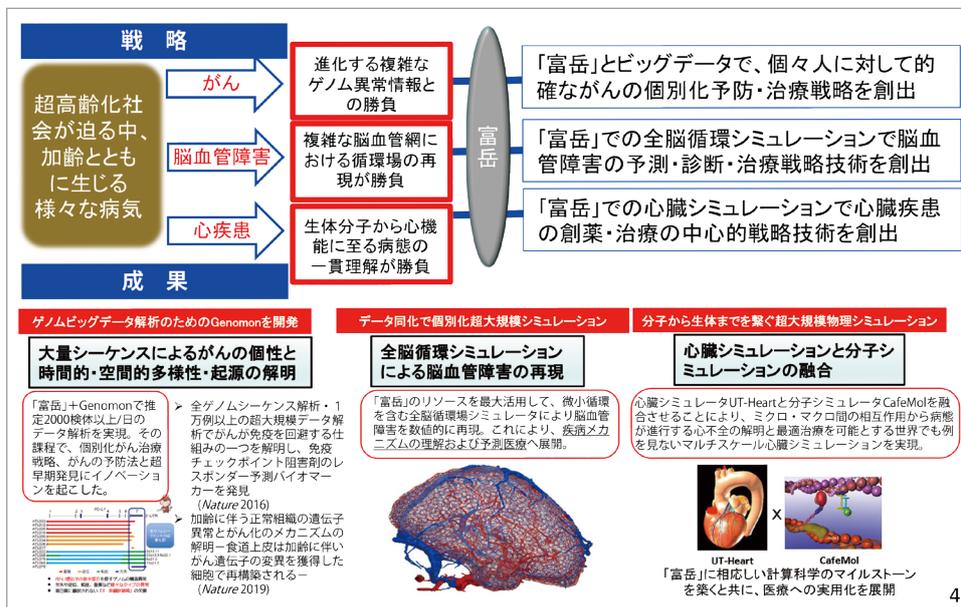


図2: 重点課題2の成果

■ Final Research Report

Subtheme **A**

人馬一体の研究



重点課題2 サブ課題A 課題責任者

東京大学医科学研究所 ヒトゲノム解析センター 宮野 悟

京都大学医学研究科腫瘍生物学講座の小川誠司先生のチームと東京大学医科学研究所のチームが主なメンバーとして研究開発を行ってきましたサブ課題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」も最終年度を迎えました。サブ課題Aは、モータースポーツのFormula 1のチームに例えれば、小川誠司先生というスーパードライバーが自在に操れるフォーミュラカーのコンストラクターを宮野が担ってきました。エンジン供給は、スーパーコンピュータの計算リソースを提供してきた理化学研究所とヒトゲノム解析センターが行ってきました。この人馬一体となった研究様子の一端を紹介することで、どのように新しい研究領域がスパコンとともに生まれ、発展し、そして人材を輩出してきたかを見たいと思います。

はじまりのはじめ

1991年に日本が国際ヒトゲノム計画に参加したころは、バイオインフォマティクスという概念はありませんでした。この言葉が一般に使われ始めたのは1998年頃からです。2000年にはヒトゲノムのドラフト版が発表されましたが、その頃のシーケンサーの性能向上は、コンピュータの性能向上とほぼ同じで18カ月で2倍になるというムーアの法則に従っていました。そのことが米国NIHのNational

Human Genome Instituteのページに記録されています(<https://www.genome.gov/sequencingcostsdata/>)。2007年頃から次世代シーケンサーが現れ、シーケンスのコストが急激に下がりはじめました。そのため、大量のデータ解析が必要となると判断し、その年に、2009年に稼働予定のヒトゲノム解析センターのスーパーコンピュータシステムが大量データに対応できるように設計を始めました。予算規模は5年利用で約50億円、年間電気代1億円というものでした。2006年10月

からグランドチャレンジプログラム「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」が茅幸二プログラムディレクター、姫野龍太郎サブプログラムディレクターのもとで始まっており、大規模シーケンスデータの解析も視野に入

はじめ

小川先生との出会いは2009年に次の癌ゲノミクスの議論を始めたことがはじまりでした。文部科学省新学術領域「システムがん」(複合領域)の領域申請をし、2010年に採択通知がきました。そのコンセプトは「がんオミクス研究に数学とスパコンを融合する」というものでした。図1は、その第1回班会議(2010年7月24日)のおり、2009年から稼働し始めた新システムShirokane1(6000CPU、1ペタバイト高速ディスクアレイ、1ペタバイト通常ディスクの性能。東大医科学研究所が白金台にあるためこの名前をつけた。)の前に計画班全員が集まったときのものです。こうして大量シーケンス技術に代表される先端ゲノミクスとコンピュータサイエンス・情報サイエンスを融合した領域が発進しました。一方で、グランドチャレンジの方は、遺伝子ネットワークなどのシステムの理解を目指した大規模データ解析で、SiGNと



図1: Shirokane1の前で小川先生(右から2番め)と

■ Final Research Report

Subtheme A

いうプログラムパッケージを「次世代スパコン」にのせるべく開発をしていました。玉田嘉紀(当時特任研究員、現・京大医学研究科特任准教授)、井元清哉(当時准教授、現・東大医科学研究所教授)、島村徹平(当時特任研究員、現・名大医学研究科教授)、山口類(当時講師、現・愛知県がんセンターシステム解析分野・分野長)が中心となって開発に当たりました。2009年11月13日(金)の午前には、あの有名な言葉「世界になる理由は何があるのか」ということばで事業仕分にあい、新分野に心を躍らせていた若い研究者達の心に傷跡を残しました。

最初の成果—東日本大震災の中で

テレビ番組「サザエさん」にでてくる磯野カツオ君は今も11歳、小学5年生です。その声の出演をしたのが高橋和枝さんです。28年間、カツオの声を演じ、骨髄異形成症候群(MDS)という病気で1999年3月、東大医学部附属病院で亡くなりました。この病気はさまざまの血液細胞が正常に作られなくなるもので、急性骨髄性白血病への移行が特徴です。その原因は膨大な研究の歴史があるにも関わらず不明でした。

小川先生との最初のチャレンジはこの病気でした。2010年当時、小川先生は東大医学部附属病院のキャンサーボードにおり、600例ほどのMDSの検体にアクセスできていました。シーケンスのコストは下がってはいましたが、大量検体の全ゲノムシーケンスをすることは小さな予算規模のプロジェクトでは無理がありました。新学術領域「システムがん」が始まると小川先生は当時の次世代シーケンサー(HiSeq2000)を使ってMDSの全エクソン解析を行いました。全ゲノム解析ではありません。同時に、東大医科研のチー

ムは、ヒトゲノム解析センタースパコン上に、超高速、効率的に変異遺伝子の候補を検出する耐故障性データ解析パイプラインを構築し、スーパーコンピュータでいかに早く高精度の変異コールまで完了できるかに精力を注ぎました。これが後にGenomonと名付けたパイプラインのベースとなっているものです。スパコンにたくさんのジョブを投げ込むと、計算ノードのメモリーの使用量が大きくなりすぎたり、ディスクへのアクセスが過度になったり、ディスクへのアクセスが過度になったりするため、異常終了することは普通です。その失敗ジョブを人海戦術的に探しだし、人手で再投入するというのが当時の世界標準でした。そこで、異常終了したジョブを自動的にデータベースに登録し、それらのジョブを後で自動投入するシステムを開発しました。長崎正朗(当時宮野研助教、現・京大医学研究科特任教授)が担当しました。これにより、劇的にデータ解析のスピードが上がり、データ解析の取りこぼしが無くなりました。同時に、血液腫瘍試料には正常細胞が混入しているという困難がありました。これを克服した高精度変異同定アルゴリズムを実験で検証しながら開発しました。白石友一(当時特任研究員、現・国立がん研究センター研究所)と吉田健一先生(当時小川研大学院生、現・英国サンガー研究所)の活躍でした。また、小川先生のところでは、高速シーケンス技術を用いて、多数検体について効率よく候補変異をスクリーニングする技術を開発しました。癌ゲノミクスの世界において1日の長があると感じた瞬間でした。

こうして研究は順調にいくかと思えたのですが、2011年3月11日(金)、東日本大震災が発生し、関東も計画停電や節電に直面しました。スパコンは電力を最も使う悪行装置とみなされ、東大柏キャンパスにある大型スパコンは停止しました。2週間近く連続運転しなければならない次世代シーケンサーも使えません。また、

震度3以上の地震が連続するとシーケンサーのエラーがでることも報告されてきました。医科学研究所は港区にあり、また研究所病院が附属していることから計画停電の対象外でしたが、6時~22時は20%まで電力使用を落とし、22時~6時は80%まで上げるという運用をしなければならなくなりました。1日の内にスパコンの計算装置の一部を停止したり、また立ち上げたりすることは簡単なことではなく、自動化は考えられていませんでした。そこで、これを自動化するシステムを、試行錯誤を重ねながら構築することに成功し、不便ながら夜中はジョブを流せるようになりました。一方、スパコンの冷却は通常20℃の冷風で行うのですが、熱だまりの調査を行うとともに、温度を0.5℃ずつ上げていき、ハードウェアエラーが統計的に優位に出ない温度を探索しました。その結果、28℃での運転が可能であることがわかり大きな節電になりました。そして東大によるスパコン停止命令という最悪の事態を回避することができました。

小川先生のMDS研究はこうした中で進行していき、29検体から最終的に268個の体細胞変異に到達し、582例の検体を用いて92遺伝子をスクリーニングし、実験により再現を確認するなどのプロセスが走りました。そして、2011年9月11日の「骨髄異形成症候群の解明」の発表となりました(Nature 2011)。そして、この発見は、RNAスプライシングの異常が、がんの発症に関わることを示した世界で初めてのものとなったわけです。大規模次世代シーケンサー解析、スパコンをフル活用した数理・情報チームとの融合により、研究開始から論文発表までわずか1年ほどでした。「システムがん」で実現し、そしてグランドチャレンジに入れ込みたかったコンセプトが正しかったと強く思いました。米国では年平均50億円の規模でThe Cancer Genome Atlas (TCGA) (<https://>

■ Final Research Report

Subtheme

A

cancergenome.nih.gov/) というプロジェクトが行われており、2011年11月17日にその第1回シンポジウム“Enabling Cancer Research Through TCGA”が開かれました。その冒頭の基調講演で米国 Broad Institute の創立所長の Eric Lander 博士（彼も数学出身の方です）は、がん研究の歴史的成果をひもとき、がんゲノミクスが解明した癌発症機構を6つあげ、そのなかでこの「RNA スプライシング異常」という小川先生の発見を述べています。この年の6月に、「京」はスパコン・トップ500で世界一になりましたが、データ解析のためのファイルシステムは後回しでした。

その後、ヒトゲノム解析センターでは、2012年からは Shirokane1 に加えて Shirokane2 が稼働し、計算能力としては225テラフロップス、3ペタバイト高速ディスクアレイ、1ペタバイト通常ディスクのシステムとなりました。このシステムの上で、ゲノムデータ解析だけでなく、RNA シーケンスからの融合遺伝子探索など様々な解析が高速・高精度にできるようになり、データ解析が安定して実施できるシステム体制が出来ました。経験ベイズ理論により、理論的に妥当でかつ実用的な変異コールルールを算出する EBCall などの開発も研究を加速しました。また、ヒトゲノム解析センターでは白石友一に加え、千葉健一、田中洋子が専任でデータ解析にあたり、さらに、小川研の方々はスパコン上でデータ解析が自在に行えるように学習を積み重ねました。また、エピゲノムデータ解析や遺伝子発現データ解析に前述の島村徹平や新たに新井田厚司が独自の方法論で臨みました。その結果、驚くようなスピードで多くの画期的成果がでるようになったわけですが。一例をあげれば、同種類のがん検体だけでなく、一人の患者さんの同じがん組織内においても想像を超えたがんの多様性や時空間で進化する癌の実態が見いだされ、癌やその他の病気のシステム

異常の複雑さの本態が次第に解ってきました。新井田厚司はがんの進化の理解を深めました。

このころ「ゆるキャラ」(図2)とともにこのパイプラインを Genomon と名付けることになりました。サブ課題 A では、この Genomon によるポスト「京」のコデザインが行われ、またジョブをスムーズに流すための Virtual Grid Engine が、本プロジェクトの伊東聡、角田将典、矢留雅亮によって開発され、「富岳」へと向かって行っております。

大規模ゲノムシーケンス解析の実態

2008年に始まった International Cancer Genome Consortium (ICGC) (<http://icgc.org/>) は、約50がん種に対して世界中で協力して主だったがんの変異のランドスケープを明らかにしようとするものです。全ゲノムシーケンスをすることが同意されて開始したのですが、功を焦るところの機関はエクソームのみの解析しか行っていませんでした。日本は理化学研究所と国立がん研究センターが中心となり肝癌を担当し300例の解析の全ゲノムシーケンス解析を実施しました。ICGC 全体でほぼデータが出そろったころ、全ゲノムシーケンスを行った検体数を集計すると3000弱でした。そのデータの Pancancer 解析



Genomon —The Zen of Cancer Genome
Sequence Analysis

図2: ゆるきゃらGenomon
- <https://github.com/Genomon-Project>

(全がん種にわたる解析)のため、ヒトゲノム解析センターも含め世界6ヶ所に同じ計算をするバーチャルマシンを構築し、同じパイプラインでもう一度変異コールをすることになったのです。しかし、バーチャルマシンはすぐに構築できたものの、結局、パイプラインは統一されず欧米で開発されてきた3つのパイプラインで3系統の変異コールが行われました。そして、コールされたこの3系統の変異セットの重複はあまり小さくなく、それぞれのパイプラインの特性が表出したものとなっていました。

Genomonの飛躍—ゲノムシーケンスデータ解析の盲点を突く

一方、Genomon は小川先生の研究の中で独自の進化を続けました。構造変異の検出については、特に中程度のサイズ(10bp ~ 1000bp)の挿入・欠失の検出は確立されたソフトウェアがなく、ゲノムデータ解析の盲点でした。そこで、MDS 研究のときと同様に数値的方法の開発(白石友一)と小川研究室(片岡圭亮先生)での実験による検証により、新しい方法論とプログラムを開発しました。またエピゲノムデータの解析は島村徹平が担当しました。

そのころ、2014年に Illumina 社の HiSeq X Ten が登場して、全ゲノムシーケンスのコストが1000ドルを切りました。米国 Broad Institute のシーケンス量は、2013年が約1ペタバイトでしたが、X Ten を導入した2014年には300ペタバイトに達しました。その当時、Google クラウドが700ペタバイト、Microsoft クラウドが110ペタバイトであったことをみると、ゲノムシーケンスデータの尋常でないビッグデータの世界が始まっていました。

成人T細胞白血病リンパ腫(ATL)は、成人T細胞白血病ウイルス(HTLV-1)の感

Final Research Report

Subtheme **A**

染が原因とされているものですが、その全貌はよくわかっていませんでした。「京」が私達の目的に本格的に活用できるようになったころ、世界最大規模で行った全ゲノム解析に基づく遺伝子異常の全貌解明研究 (Nature Genetics 2015) では、予備実験で 90% 以上 (133/143) の構造異常の正答率を達成し、ATL48 検体の全ゲノムシーケンスデータからは 2857 の様々な構造異常が見つかりました。この Genomon の大きな特徴は、比較的短い範囲の挿入・欠失が検出可能となっていることです。例えば、急性骨髄性白血病では、約 25% の患者さんの *FLT3* と呼ばれる遺伝子に、約数十塩基から数百塩基の tandem duplication がエクソン内に起こる現象が知られています。こういったいわゆる「中間」のサイズの変異は、これまでの点変異検出のソフトウェアと構造変異検出のソフトウェアでは検出が無理でした。さらにこの方法論では、エクソームデータから染色体間の転座が検出可能なのです。これにより、ブレークポイントがエクソンの近くにあるものが抽出可能になりました。前述の ICGC で用いたようなソフトウェアではこうした検出はできていませんでした。

この研究に引き続いて、1万を超える検体データの解析により、がんが免疫系を

回避する仕組みのひとつ「*PD-L1* 遺伝子の 3' 末端非翻訳領域の構造異常」が解明されました (Nature 2016)。

どのパイプラインがよいかという科学的判定は難しいところですが、少なくとも小川先生を初めとして Genomon を使った研究者のがんゲノミクスの成果の実績はその有効性を証明していると思っております。Genomon +スパコンによる人馬一体の研究は、主なものだけでも次の表にあるような成果を出してきました。

「富岳」と共に未来に向かって

がんゲノミクス研究は計算リソースをいかに確保するかが課題になると考えています。実際、2016 年 3 月に米国 NIH National Cancer Institute とエネルギー省は協力して癌研究のために計算リソースを提供するという発表をしています。そして、データのデモクラタイゼーションへ向かってビッグデータをどのように世界的に維持していくか、エコシステムの議論が始まりました。これに対応して、2016 年 11 月には米国 NIH の主導でフランスのストラスブールの HFSPo で第 1 回の会議が開かれ私も出席しました。そしてホワイトペーパーが準備されました (Nature 2017)。

がんの全ゲノムシーケンスをすれば、数百万力所の変異候補が見えてくることは普通です。「400 報ぐらいの最新の論文を読んでも解釈はほとんどできない」という現状にも直面しています。そのため人工知能技術を導入して人知を増強する方法論が導入され始めています。こうした事実を鑑み、重点課題の開始時では人工知能の重要性の認識がプロジェクトとしては弱く入れ込めませんでした。2015 年開始の文部科学省新学術領域「システム癌新次元」(複合領域) を小川先生と共に立ち上げ、人工知能の導入をはかってきました。そして、「富岳」では、「大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明」を標榜した計画をたてており、ゲノムシーケンスデータ解析パイプライン Genomon 及びネットワーク解析アプリケーション SiGN とネットワーク深層学習システム Deep Tensor 等により、正常組織においてどのように遺伝子変異クローンが生じるのか、遺伝子変異ないしその組み合わせがどのように細胞の表現型を決定するのか、さらには、その多様性・複雑性のために研究が進んでいないゲノムの構造異常が発がんにどう関わるのか、について解明したいと考えています。

表1: Genomonとスパコンによる人馬一体の主な研究

Nature 2019	潰瘍性大腸炎による上皮再構築メカニズムと発がんとの関係解明
Nature 2019	加齢に伴う正常組織の遺伝子異常とがん化のメカニズムの解明
Nature Microbiology 2019	慢性活動性 EB ウイルス感染症の原因と、身近なウイルスががんを引き起こす仕組みを解明
Nature Genetics 2017	急性白血病を起こす 2 ステップの遺伝子異常のパターンの発見
Nature 2016	免疫系を回避するがん細胞のゲノム異常の解明
Nature Genetics 2015	ヒト白血病ウイルスと T 細胞の戦場跡の全貌
N Eng J Medicine 2015	再生不良性貧血のクローン進化
Nature 2011	骨髄異形成症候群の解明

Final Research Report

Subtheme **B**

コンピュータシミュレーションで医療を支援する

重点課題2 サブ課題B 課題責任者

大阪大学大学院基礎工学研究科(兼)大阪大学国際医工情報センター 和田 成生



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、生命維持機能の中核となる血液循環系と、高齢化社会におけるQOLの維持に欠かせない身体運動系および口腔発話系に対して、患者個別の医療を支援する計算機シミュレータの開発を行ってきました。本報では、その研究成果をご紹介します。

1. 全脳血液循環シミュレータの開発

脳循環は、神経活動に必要な酸素や栄養を脳組織に供給するために重要な役割を果たしています。しかし、脳の全ての血管に血液が滞りなく送り込まれる仕組みや、脳血流量を制御するメカニズム、脳血管障害が生じたときの応答など、いまだに明らかにされていないことが多くあります。これらの問題には、個人ごとに異なる脳血管系の構造や形態が関与していると考えられます。そこで、医用画像計測と数理モデルを組み合わせることにより、リアリティの高い個別の全脳レベルの血管モデルを作成し(図1)、スーパーコンピュータ「京」や「富岳」を用いて脳血流解析を行うためのシミュレータの開発を行ってきました[1, 2]。

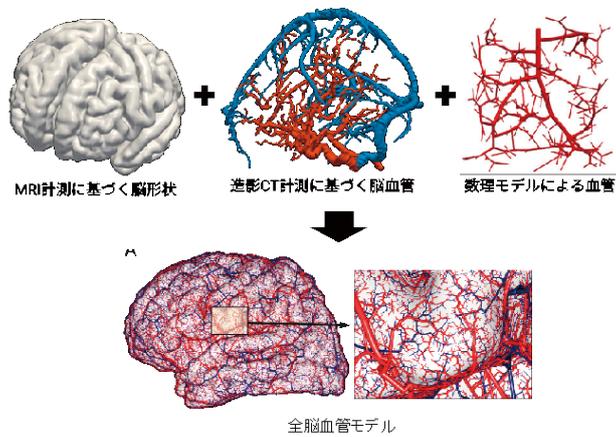


図1: 全脳血管モデル

「京」を用いて得られた計算結果の一例を図2に示します。使用した総格子点数は約4億点で、並列計算のために20000個の領域に分割し、24時間で実時間4秒間の計算を行いました。図中の赤、青、黄で示されている流体はそれぞれ椎

骨動脈、左頸動脈、右頸静脈から流入した血液を表しています。それぞれが異なる経路で脳全体へと循環し、左右の頸静脈へと収束する様子が確認できました。全脳レベルでの大規模な血流場の数値再現は世界的にも例がありません。

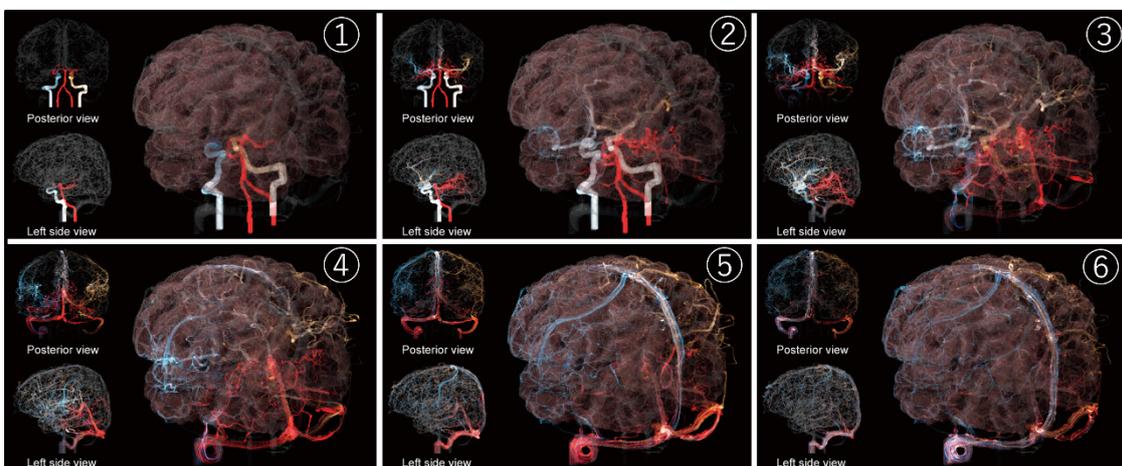


図2: 全脳循環における血流解析の結果

Final Research Report

Subtheme **B**

図3は、左中大脳動脈を仮想的に閉塞させた時の血流分布の結果です。脳梗塞後では左脳側への血流が減少していることが確認できます。右側の図は、医用画像に近い解像度で計算結果を平滑化し、元の医用画像に重ね合わせて表示したものです。このような画像は臨床でも得られるようになってきており、計算結果と計測結果を比較したり、同化させたりすることにより、患者個別の病態を評価していくことが可能になります。

2. 脳動脈瘤コイル塞栓術の治療支援シミュレータ開発

脳動脈瘤とは脳の動脈の一部が局所的に風船状に膨れる疾患で、血流による刺激により破裂するとクモ膜下出血を引き起こします。瘤の破裂を防ぐ治療法として

世界的に主流な方法にコイル塞栓術があり、金属製ワイヤを一重のらせん形状にしたもの(コイル)を瘤の中へカテーテルを通じて留置し、瘤へ流入する血流を抑制する方法です。従来の外科手術と比較して安全ですが、コイルの充填率や分布によっては長期の治療効果が保たれないリスクが知られています。そこで、瘤内に挿入したコイルのリアルな形状を表現する力学モデルを構築し、コイル塞栓術時の瘤内血流動態を再現するシミュレータを開発しました[3]。これにより、患者ごとにより異なる動脈瘤の位置や形状に対して、瘤内での血流を十分に停滞させるのに必要なコイルの充填率を予測できるようにしました。また、「京」を用いた大規模数値流体計算(図4)により、コイルの分布のばらつきと瘤内血流の滞留度合との関係から、動脈瘤の根元で再拡張が起こりやすい原

因を明らかにすることができました[4]。

3. 左心房内血流の患者別解析フレームワークの開発

左心房は心臓の左上にある領域の一つで、肺静脈から流れる動脈血を左心室へと輸送する役割を持っています。正常な左心房は自らも能動的に駆動することで左心室の補助ポンプとして働きますが、加齢などの要因により左心房の肥大化や運動機能が低下し、これにより左心房内の血流の停滞が生じ、血栓症のリスクが増大します。左房で生成された血栓が移動し、脳血管を塞栓することで心原性脳梗塞を誘発することが知られており、この血栓化リスクの患者別評価を目指して、左心房内血流の患者別解析用フレームワークの構築を試みました。

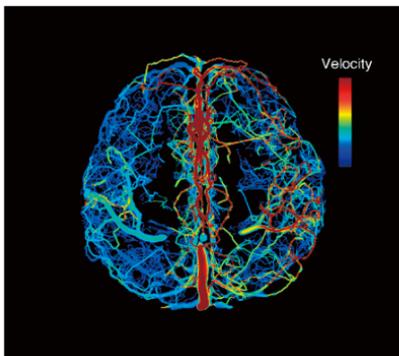


図3: 脳梗塞モデルによるシミュレーション結果

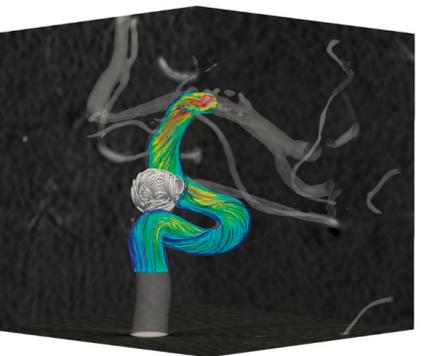
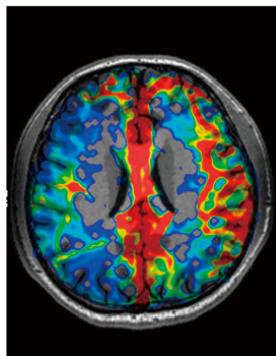


図4: コイル塞栓された脳動脈瘤内の血流シミュレーション

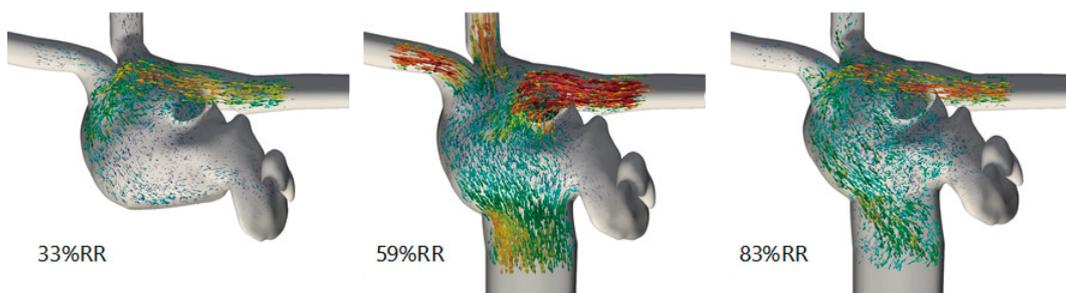


図5: 4D-CD画像から再現した左心房内の血流速度場

■ Final Research Report

Subtheme **B**

心臓疾患の診断で標準的に使われる医用4D-CT計測により、1心拍を20分割した各位相での左心房の形状を患者ごとに取得できます。この形状情報を使って、1心拍中の左心房運動を推定するアルゴリズムを構築しました。得られた左房形状および運動情報を使った左心房内血流の数値シミュレーションを行い、生理学的に妥当なフローパターンを取得することに成功しました(図5)[5]。現在、このシミュレータを用いて、心房肥大や肺葉切除による心房内血流動態の変化を調べ、それが心房内血栓形成に及ぼす影響について調べています。

4. 微小循環遊走細胞解析プラットフォームの開発

近年、多光子顕微鏡が開発され、生体内の微小な部位を可視光で観察できるようになってきました。本研究では、これにより得られる大規模な画像をデータ解析することで、細胞(例えば、毛細血管内の血流に沿って流れる血球細胞)の動きを検出し、生体内で起こっている現象を明らかにするシミュレータの開発を行ってきました。

ここでは、細胞の動きを検出するのに深層マッチング法を用いました。具体的に

は、 8×8 画素の小領域に分割して、時間的に連続する2枚の画像間で一方の画像の小領域と他方の画像の小領域をペアにして畳み込み演算を実行し、この操作を領域の縦横のサイズを倍々にして領域が画像全体になるまで繰り返します。次に、逆に画像全体領域から小さな領域に向けて、局所最適な対応を探索しながらつなげて、画像全域に渡って対応付けられた領域ペアを検出します。これにより、画像全体で領域のサイズを変えながら畳み込み演算で類似性を判定することができるようになりました[6]。

マウスの毛細血管を多光子励起顕微鏡で経時的に観察した画像に対して、白血球の動きを深層マッチング法と従来のオプティカルフロー法で検出した結果を、図6に示します。図6では、血流は画像の下から上に向けて流れており、白血球は緑色に、血管は赤く表示されており、検出された小領域の移動(大きな移動のみ)を白い矢印で表しています。(a)の深層マッチング法ではすべて血流と同じ方向で正しく検出されているのに対して、(b)のオプティカルフロー法では一部(黄色の丸で囲まれた部分)で血流とは逆向きの移動があるように間違った表示がされています。

深層マッチング法は、「京」全ノードを

使って並列処理することで約829万フレームという膨大な量のマッチングを約41分で実行できました。利用している多光子励起顕微鏡では30フレーム/秒で画像を取得できますが、例えば、炎症の進行を観察するには、急性の炎症で3~4時間以上持続するため、フレーム数にすると32.4万~42.3万フレームの計算が必要です。さらに慢性の炎症は1週間以上かけて徐々に進行するとされているため、膨大な量のフレームを解析する必要があります。また、個別化医療のために個体差を検討するためには数百から数千例を処理することが必要と考えられます。以上を考慮すると、富岳規模の計算資源の利用が必要になると考えられます。今後、多光子励起顕微鏡から得られる画像データのスーパーコンピュータによる解析が進んでいくのではないかと期待されます。

5. 神経系-筋骨格系統合シミュレータの開発

ヒトは静かに立っているとき、ゆらゆら揺れながら直立姿勢を保持しています。転倒しないための姿勢のコントロールはどのように実現されているのでしょうか?

ここでは、ヒト直立姿勢の制御の仕組み

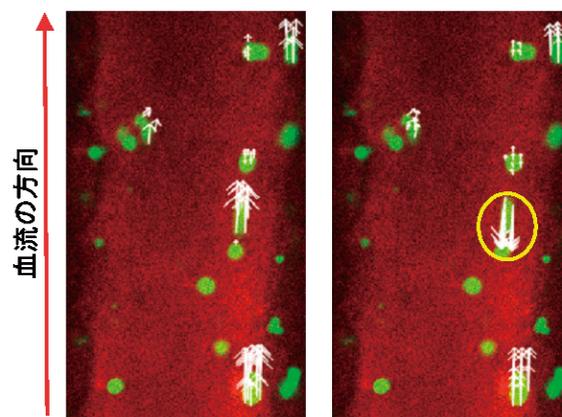


図6: マウスの毛細血管中の白血球の移動を検出した例

Final Research Report

Subtheme B

を明らかにすることを目指して、神経-筋-骨格系の統合シミュレータの開発を行いました [7]。

本シミュレータは、ミクロな収縮タンパク質の確率的な挙動から、骨格筋の収縮挙動および関節運動というマクロな振る舞いを再現するマルチスケール筋骨格系運動シミュレータです (図 7)。本シミュレータで静止立位保持のシミュレーションを行った結果、従来から神経生理学の教科書で説明されてきた姿勢制御の仮説では立位姿勢を安定的に保持することはできず、姿勢の状態に応じて適切なタイミングで速やかに筋を弛緩すること (制御のスイッチをオフにする) を繰り返すことで姿勢を安定化するという間欠制御が、立位姿勢の安定化に有効であることが明らかになりました。

本シミュレータによる静止立位や二足歩行を安定に実現する神経・筋・骨格系の統合的メカニズムの解明は、進化の過程におけるヒト二足直立姿勢の獲得メカニズム、日常生活の基盤運動の達成メカニズムの解明、さらには神経疾患、筋疾患、あるいは怪我・外傷に起因する運動障害 (姿勢・起立障害) の発生メカニズムの解明、およびそれらの診断・治療法の開発

につながります。さらに、加齢に伴う転倒リスク増大のメカニズムの解明とその回避方策、リハビリテーション手法の開発にとっても重要な役割を果たすことが期待されています。

6. 口腔流体音響シミュレータの開発

言語による高度な会話は人間だけが持つ機能であり、他の動物と人間とを区別するものとなっています。チンパンジーや犬等の哺乳類や鳥類は、比較的単純な音を用いたコミュニケーションを行います。しかし、人間以外の動物が用いる音は単純な符号の羅列であり (情報学的には確率過程に分類され)、人間が用いている言語とは異なっています。人間が用いる音は、2つの特徴 (階層性と再帰性) を有しており、それによって複雑な文法を用いて、未知の単語を容易に組み入れ、言葉として利用することができます。我々が取り組んだ口腔領域は、音を口腔で調整する構音や表情を司り、人間らしく生きるために必須の役割を担っています。

構音の実験は人間を用いてしかできないという問題があります。歯科技工技術

を応用することで、できるだけ精緻な人工的なモデルを作り、物理実験を行うことができます。しかし、人工的なモデルでは、人間が発する音を完全に再現することができません。そのため、我々は、これまでに既に分かっている理論を (流れや音の伝播を表す) 数式で表し、その数式を計算機を使って近似的に解くことにより、人間が発する音の再現を試みてきました (図 8)。これによって、まるで生きたモデルを構築したかのような音を、デジタルの世界で実現することに成功しました。具体的には、同年代成人男子 5 名が「うすい」と構音したときに口の中の流れや音がどのようになっているかをシミュレーションによって再現しました [8]。また、「うすい」と構音したときに、舌の上げ下げを人工的に人間では不可能な速度で行った際に、音はどのように変化するかを明らかにしてきました。我々がこのプロジェクトで研究開発した内容は、今後インターネットを介した SNS や AR など、物理と情報が分離されて使われていく時代において、人間らしさとは何かを問う研究として発展していくと考えています。

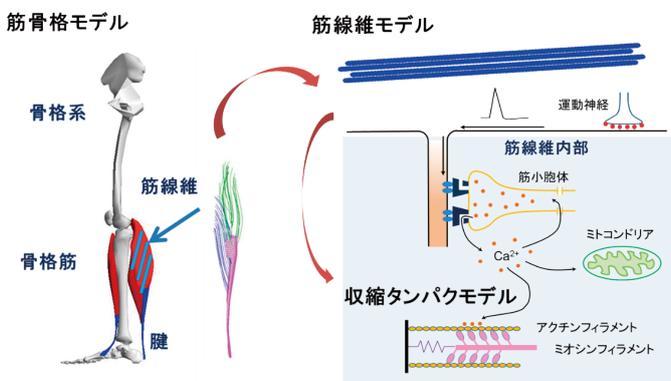


図7 (左) : 神経筋骨格系のマルチスケールシミュレータ

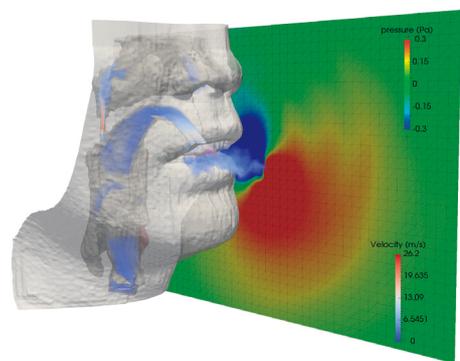


図8 (右) : 「京」を用いて計算した「す」の一部[s]を構音した際の気流と音の伝播。肺から喉頭、咽頭を通過して口腔に空気が流れるが一部は鼻腔へも漏れている様子を示している。

Final Research Report

Subtheme **B**

おわりに

本サブ課題では、脳や心臓の血液循環系、身体運動系および口腔発話系に対して、「京」で開発されてきた大規模数値解析技術や大規模ネットワーク解析技術を基盤として、患者個別の生体情報と物理の原理に基づいた生体シミュレータを開発しました。各シミュレータにおいて、実測される医用画像、血流速度、筋骨格運動、音響スペクトル、ライブセルイメージングなどの in vivo 生体計測データと融合させることにより、生命維持や生活の質 (QOL) に関わる医療に有効な物理情報を提供するものです (図 9)。現在、実際の医療現

場と協力し、健康長寿社会を支える計算科学に立脚した新しい医療工学の創生に向けて、医工情報学連携の研究開発が進められています。

謝辞

本研究を推進するにあたり、下記の研究分担者のご協力をいただきました。このユニークな研究を生み出してきた彼らの超越した能力とパワーに敬意を表し、感謝申し上げます。(敬称略)

全脳循環シミュレータ開発

- 首都大学東京大学院システムデザイン研究科 伊井仁志
- 神戸大学大学院工学研究科 今井陽介、石田駿一

- 大阪大学大学院基礎工学研究科 武石直樹、横山直人

個別化医療支援のための計算シミュレータ開発

- 大阪大学大学院基礎工学研究科 大谷智仁

微小循環遊走細胞解析プラットフォームの開発

- 大阪大学大学院情報科学研究科 松田秀雄

神経系-筋骨格系統合シミュレータ開発

- 東京大学大学院工学系研究科 山村直人、高木周
- 大阪大学大学院基礎工学研究科 野村泰伸

口腔流体音響シミュレータの開発

- 大阪大学歯学部附属病院 野崎一徳、玉川裕夫
- 豊橋科学技術大学機械工学系 吉永司

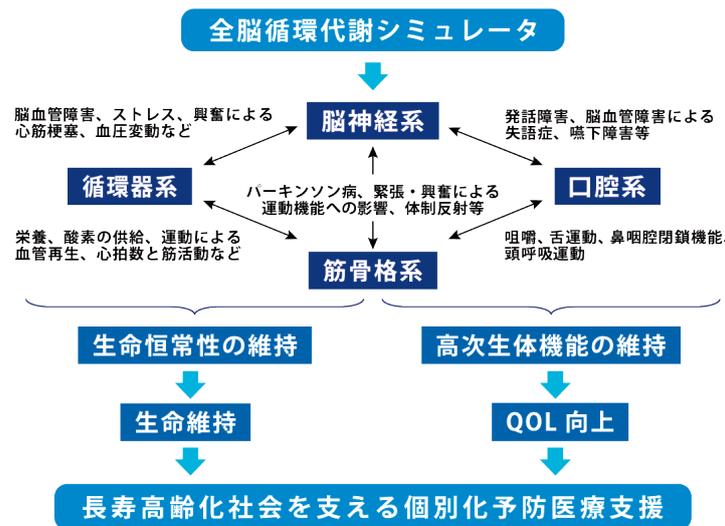


図9: 健康長寿社会を支える個別化医療支援

<参考文献>

[1] Kitade H, li S, Imai Y, Ishida S, Wada S, Modeling cerebral vasculatures for analysis of the whole cerebral circulation, *Proc IBCME2019*, 2, 859-862, 2019.

[2] Ishida S, Kitade H, li S, Takeishi N, Watanabe Y, Imai Y, Wada S, Development of a numerical model of whole-scale cerebral circulation, *J Cereb Blood Flow Metab*, 39, Issue 1_suppl, 615, 2019.

[3] Otani T, li S, Shigematsu T, Fujinaka T, Ozaki T, Hirata M, Wada S, Computational study for the effects of coil configuration on blood flow characteristics in coil-embolized cerebral aneurysm, *Medical & Biological Engineering & Computing*, 55, 697-710, 2017.

[4] Otani T, Shindo T, li S, Hirata M, Wada S, Effect of local coil density on blood flow stagnation in densely coiled cerebral aneurysms: a computational study using a Cartesian grid method, *J Biomech Eng*, 140, 041013, 2018.

[5] Otani T, Al-Issa A, Pourmorteza A, McVeigh ER, Wada S, Ashikaga H, A computational framework for personalized blood flow analysis in the human left atrium, *Annals of Biomedical Engineering*, 44, 3284-3294, 2016.

[6] Shigeta H, Seno S, Nishizawa S, Uchida Y, Kikuta J, Ishii M, Matsuda H, Analyzing leukocyte migration trajectories by deformable image matching, *IEEE 19th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE)*, pp.94-98, 2019.

[7] Yamamura N, Takagi S, Nomura T, *IEEE 16th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering*, pp. 338-341, 2016.

[8] Yoshinaga T, Nozaki K, Wada S, Aeroacoustic analysis on individual characteristics in sibilant fricative production, *Journal of the Acoustical Society of America*, 146, 1239-1251, 2019.

Final Research Report

Subtheme **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

重点課題2 サブ課題C 課題責任者

株式会社 UT-Heart 研究所 久田 俊明



課題名に込められた理念のもとに、サブ課題Cでは図1に示す二つのテーマの研究を実施しました。以下それぞれについての主要な成果を簡潔に述べたいと思います。

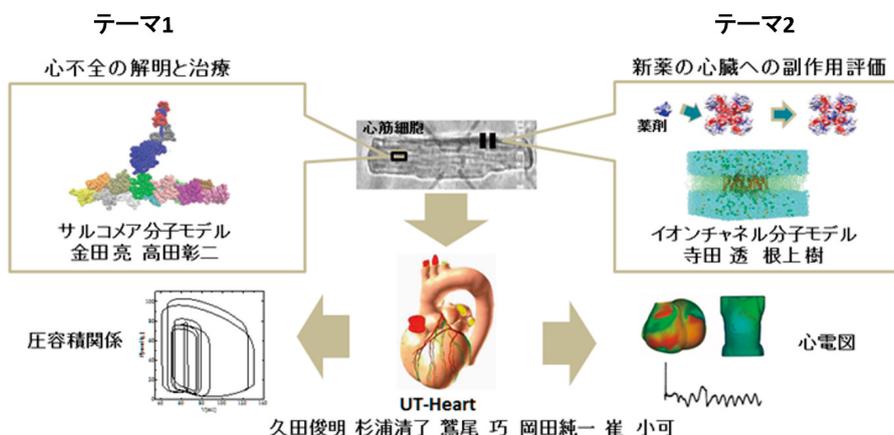


図1: サブ課題Cにおいて取り組んだ二つの研究テーマと主要メンバー (テーマ2は重点課題1[奥野恭史責任者]との共同研究)

テーマ1: 心不全の解明と治療

「京」を用いたこれまでの UT-Heart の研究では、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の開発を行って来ました。但しここでは図2左に示されるように、アーム部がばねで表されたミオシンのヘッドに ATP が結合し加水分解することによってアクチンフィラメントとの間に確率的な首振り運動を行う数理モデルが統計力学の法則に基づき定義され、各クロスブリッジの発生力ひいてはサルコメアの収縮力が計算されていました。ポスト「京」においてはこれを同図右のように粗視化分子シミュレーションモデルで置き換え心臓モデルと連成させます。これにより、アミノ酸レベルの変異と病態の間にこれまで

ブラックボックスとして存在していた因果関係のメカニズムの解明に切り込むことができますと考えられます。粗視化分子シミュレーションモデルの開発は理化学研究所・金田亮博士ならびに京都大学・高田彰二教授の協力を得て行われました。図3はパワーstroke運動の1サイクルにおける総ての化学状態での構造が既知である

ミオシンVIを鋳型に、ヒトのアミノ酸配列とのシーケンスアライメントからヒトミオシン分子モデルを作成し、各化学状態に相当する力場スイッチを切り替えることによってパワーstrokeシミュレーションを行った結果を示します。レバーアームのstroke量、発生力など実験事実と矛盾しない分子モデルを作ることが出来まし

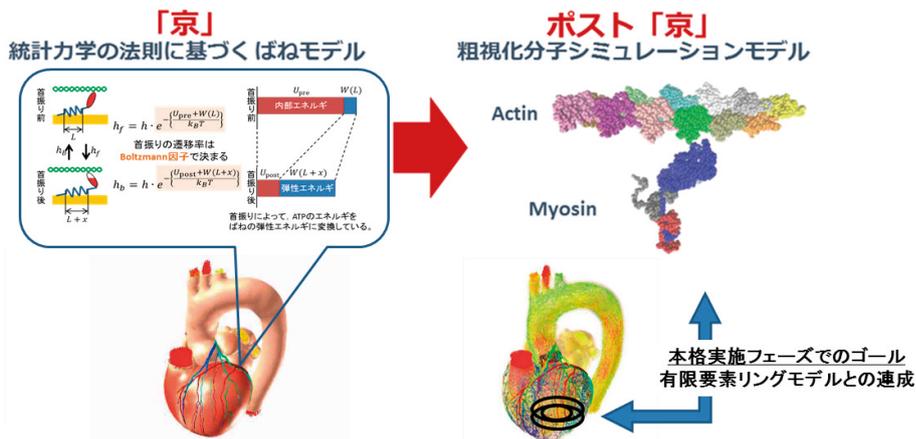


図2: UT-Heartマルチスケールシミュレーションの拡張と重点課題でのゴール

Final Research Report

Subtheme C

た。更に詳細は略しますが、力場スイッチの切り替えは、CafeMol ポテンシャルのごく一部のローカル相互作用項のみに限定し、図4に示されるようにATP加水分解エネルギーに近い35KT程度のエネルギーを与えるだけでパワーストロークを成功させました。そして最終的に、重点課題でのゴールとして設定された有限要素リングモデルとの連成シミュレーションを達成しました。図5は連成シミュレーション結果の一例を示したものです。ここでの有限要素リングはただか8個の有限要素から構成される試験的な小規模問題ですが、体循環を模擬した回路が接続されており、内腔容積の変化に応じて血圧に対応する圧力がリング内側面に負荷されるようになっていきます。また各有限要素には180個のミオシン分子モデルが埋め込まれており、1個のミオシン分子モデルは800を超えるアミノ酸粒子から構成さ

れています。従って、各粒子はx,y,z各方向に運動できますので自由度としてはその3倍の2400以上になり、掛け算をしてみればこの小規模なリングモデルの例題ですら300万以上の自由度を持つ巨大なマルチスケール問題になっていることが分かります。なお図中に示されるように、ミオシン分子モデルからは収縮力が有限要素に伝達され刻々のリングの釣り合い問題が解かれる一方、その結果得られる個々の有限要素の歪がレバーアームを通じて分子モデルにフィードバックされ、各分子の運動ひいては収縮力もまた変化します。具体的内容は今後論文で発表しますが、このような異なるスケール間の相互作用を考慮した連成解析法の開発が本プロジェクトの柱となり、その成功によりゴールに到達することが出来ました。本例題解析の結果としては、定量的にもリング内部には最大100mmHg程度の血圧を生じ、また

マクロ有限要素の歪や応力なども生理学的に妥当な値を示しました。更に、アミノ酸変異を仮定したミオシン分子による連成シミュレーションも試験的に行いましたが、収縮力自体に大差はなく、しかしパワーストロークサイクルにおける各状態の存在比率が正常ミオシンモデルと異なるものとなったため拍出量が20cc程減少するという興味深い結果を得ることが出来ました。以上の成果を踏まえ、いよいよ「富岳」では肥大型心筋症などアミノ酸変異に実測のものをういた心臓モデルの連成シミュレーションを実行することになります。

テーマ2：新薬の心臓への副作用評価

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イオン電流など各種イオン電流の細



図3：新たに開発したミオシンモータードメインの粗視化分子モデルとそれに基づくパワーストロークシミュレーション

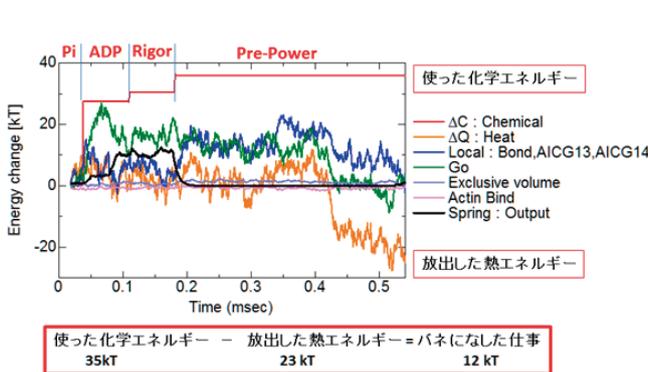


図4：パワーストロークシミュレーションにおけるエネルギー収支

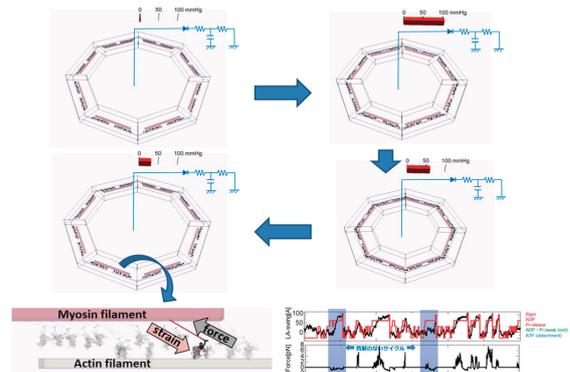


図5：有限要素リングモデルとミオシン分子モデルの連成シミュレーション例

Final Research Report

Subtheme C

胞への出入りを制御するイオンチャンネルについても分子シミュレーションモデルを構築し、これと薬剤との結合・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。創薬の過程においては候補化合物が心臓に及ぼす毒性、特に不整脈を中心とする心毒性のスクリーニングを正確かつ迅速に行う必要があります。UT-Heart 研究チームでは、これまでエーザイ株式会社の澤田光平博士（現東京大学薬学系研究科客員教授）、吉永貴志博士、東京医科歯科大学の古川哲史教授、黒川洵子准教授（現静岡県立大学薬学部教授）と共に、薬剤による各イオンチャンネル阻害率をパッチクランプ実験により計測し、これと心臓シミュレーションを組み合わせた in vitro-in silico ハイブリッド心毒性評価システムを開発し検証を進めてきました。ポスト「京」における研究開発では、図6に示されるように、このパッチクランプ実験を分子シミュレーションで置き換えることにより、候補化合物の構造が与えられれば計算機シミュレーションのみで心毒性評価を行うことが可能な in silico-insilico 心毒性評価システムの開発を目指します。分子シミュレーション部は重点課題1（責任者：京都大学・奥野恭史教授）とのコラボレーションにより東京大

学・寺田透准教授が開発しました。具体的には、イオンチャンネルは一般に図7に示されるように電位センサードメインと細孔ドメインから構成されますが、この細孔ドメインと薬剤とのドッキングシミュレーションならびに結合自由エネルギー計算を経てチャンネル阻害の指標である IC50、Hill 係数を評価する手法を確立しました。結合自由エネルギー計算には東京大学先端科学技術研究センターの故・藤谷秀章先生が開発された MPCAFFEE 法を用いています。そして本研究期間では IKr ならびに INa イオンチャンネル分子モデルを構築し、これら二つのチャンネルに対して不整脈リスクが既知の7薬剤に対するシミュレーションを実施し、得られた IC50、Hill 係数から定まる濃度・阻害率関係を UT-Heart に用いて不整脈発生濃度を算出しました。なお他のチャンネルについては従来のパッチクランプ実験に基づき得られている濃度・阻害率関係を用いました。結果の詳細については今後論文で示したいと思います。

なお以上における UT-Heart シミュレーションでは、イオンチャンネルの数理モデルとして電気生理学の分野で国際的に評価の高い ORd と呼ばれる数理モデルを用いていますが、もしこの数理モデルを分子シミュレーションモデルに置き換えることが

できれば、テーマ1と同様、遺伝子変異の影響まで取り入れた不整脈発生リスクの評価が可能となります。不整脈には遺伝性のあることは良く知られており、創薬においてはそのような場合のリスクも必要となります。そこで前述の電位センサードメインを分子シミュレーションモデルで置き換えることを試みました。具体的には、電位センサードメインは4本のヘリックスから成り、そのうちの一つに荷電したアミノ酸が多く存在し、細胞膜内外の電位差に応じて Up、Down の動作をすることでチャンネルの開閉が行われますが、その Up、Down 状態の間の遷移の速度定数を分子シミュレーションを用いて決定しました。図8は IKs チャンネルについて電位センサードメインを分子シミュレーションモデルへ置き換えた場合の結果と、総て ORd モデルを用いた場合の結果を比較したものです。ここでは薬剤によるチャンネル阻害はないものとしています。今後 hERG など他の重要なチャンネルについてこのような分子モデル化を進めていきます。

更にハイスループット心毒性評価システム実現へ向けての戦略として、各チャンネルの阻害率が得られた後に、毎回大規模心臓シミュレーションを実施するコストを省くことを目的とし、不整脈発生に関係

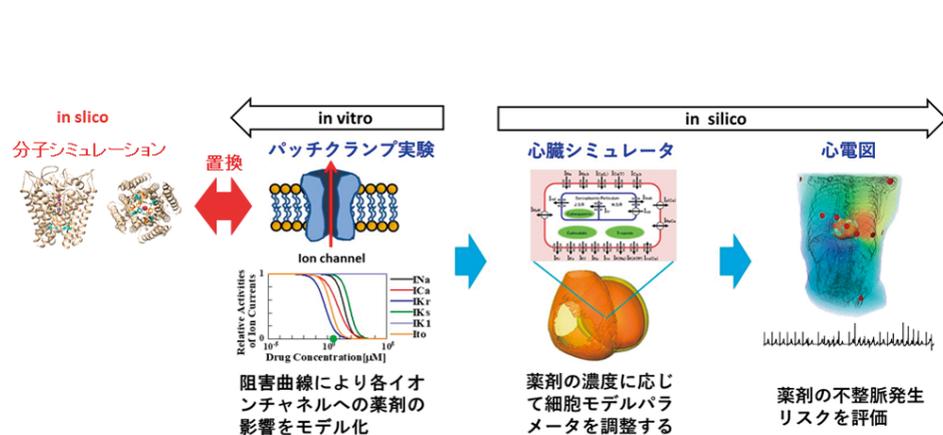


図6: UT-Heart による in vitro-in silico ハイブリッド心毒性評価システムから完全な in silico 心毒性評価システムへの拡張

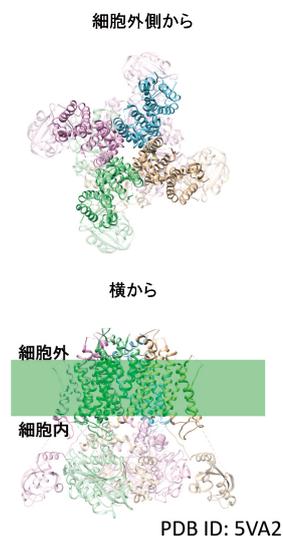


図7: hERGチャンネルの立体構造

Final Research Report

Subtheme **C**

するとされる5種類のイオン電流 I_{Na} 、 I_{Ks} 、 I_{Kr} 、 I_{Ca} 、 I_{NaL} が種々の抑制割合で組み合わせられた合計 9075 の阻害パターンに対する UT-Heart シミュレーションを予め実行しました。そして得られた心電図等をデータベース化し「心毒性ハザードマップ/心電図データベース」として UT-Heart 研究所のホームページ (<http://ut-heart.com/ECGdata/index.html>) において公開しました (Okada, et al., British J. Pharmacology, 2018)。これが実現できたのは「京」コンピュータのパワーがあったからこそです。「心毒性ハザードマップ/心電図データベース」の機能のイメージを図9に示します。さらに全数値データも FigShare データレポジトリ (doi: 10.6084/figshare.5946739) で公開しました。

本データベースは極めて専門性の高いものであり、新薬の開発を行う製薬会社や CRO のみが参考にすると考えられますが、2018年5月の公開以来、1か月当たり40件近くのアクセスがコンスタントに続いており、微力ながら我が国の創薬産業に貢献していると考えられます。

「富岳」の次に繋げるために

「京」からポスト「京」へ移行しつつある現在、「計算機の進歩を予測した上での研究計画立案の重要性とそれを実現する技術開発の必要性」はさらに増えています。既成概念にとらわれない発想と腰をすえた学術的深化が求められています。……(中略)…… 私たちは「京」の出現、そしてポ

スト「京」への発展という歴史の節目に立ち会う幸運に恵まれました。しかし冒頭に触れたように時間はあっという間に過ぎ去ります。私たちは10年後に再び繰り返されるであろう議論を建設的なものにするだけの成果を挙げる責務を負っています。志を高く持ち力を集中することで計算科学の歴史に新たなマイルストーンを築きたいと考えています。”

以上は本重点課題2のNews Letterシリーズ初刊号に寄稿した拙文の一部です。上記の「議論」とは、もちろん「富岳」の次のフラッグシップマシンを作ることは是非に関する社会的議論のことです。これを胸に刻んで4月からの3年に臨みたいと思います。

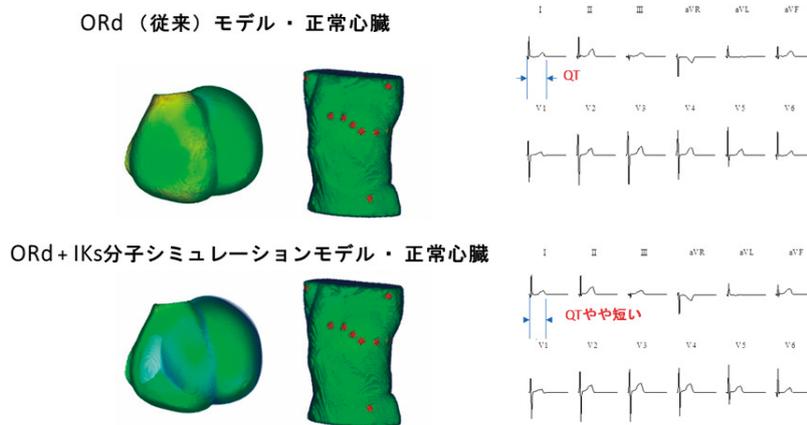


図8: 従来のUT-Heartにおける心電図 (上段) と分子シミュレーションをもとに得られた心電図 (下段)

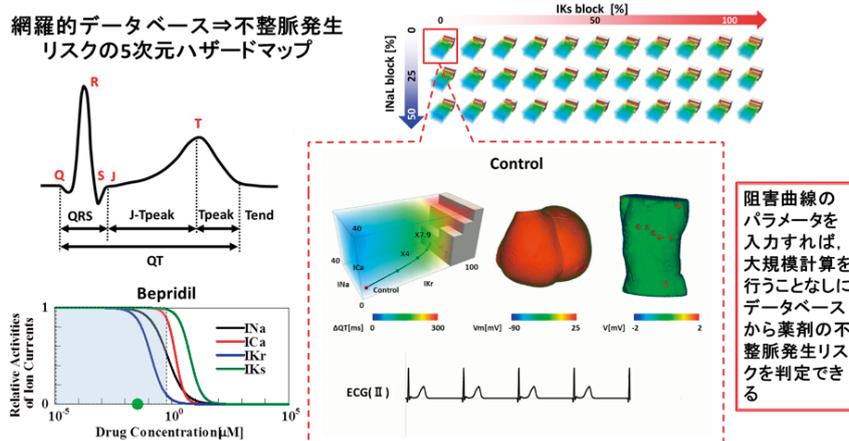


図9: 「心毒性ハザードマップ/心電図データベース」の機能

受賞報告:

1) 10th Asian-pacific Conference on Biomechanics (AP Biomech 2019) Best oral Award

サブ課題Bの大谷智仁助教が、11月2日に台湾で開催されたAP Biomech 2019のセッションにおいて、優秀な発表に授与されるBest Oral Awardを受賞しました。

● **Title** : A Cartesian Grid Method for Solving Blood Flow in Left Atrium with Considering Prescribed Moving Wall Boundary Condition

● **Awardee** : Tomohiro Otani (Osaka University, Japan)

2) APACM Award for Senior Scientists

サブ課題Cの久田俊明課題責任者が、Asian Pacific Congress on Computational Mechanics 2019において、APACM (Asian Pacific Association for Computational Mechanics) より Senior Scientist Awardを受賞しました。このAwardは、アジア太平洋地域において計算力学に多大な貢献をした65歳以上の研究者に授与される賞です。

3) 第16回 ヘルシー・ソサエティ賞

重点課題2の宮野悟課題責任者が、第16回ヘルシー・ソサエティ賞を受賞しました。この賞は、よりよい明日に向け健全な社会と地域社会の幸せを願い、国民の生活の質(QOL)の向上に貢献した人々を称える目的で、日本看護協会とジョンソン・エンド・ジョンソン日本法人グループにより創設されました。

UT-Heartの映像が東京大学YouTube研究者インタビューに

UT-Heartシミュレーションの映像が、東京大学YouTubeチャンネルの研究者インタビュー動画で使用されました。登場する東京大学大学院工学系研究科の波田野明日可講師は、心臓や細胞に関する生体シミュレーションを研究

しています。インタビューでは、より良い医療の実現を目指す波田野さんの研究がUT-Heartの映像によってダイナミックに伝わってきます。この映像が架け橋となり生体シミュレーションの研究はさらに次の世代へと受け継がれていくことでしょう。なお、本UT-Heartシミュレーション映像は事務局・神内衣里香が理化学研究所在籍時に企画・製作支援し、Youtube英語版は欧米を中心に30万回以上再生されています。

● 東京大学YouTubeチャンネル

波田野 明日可ーシミュレーションで心臓をモデル化
<https://www.youtube.com/watch?v=rn2CxX3DFZU>

ポスト「京」重点課題の終了のお知らせ

本プロジェクトは、2020年3月31日をもちまして終了いたします。今までご支援くださり本当にありがとうございました。2020年4月からはスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムが始まります。加速プログラムは、超スマート社会の実現を目指すSociety5.0において、計算科学とデータ科学を組み合わせた新たな科学的アプローチの研究開発を推進し、科学的・社会的に重要な課題の解決に貢献することを目的としています。これからも加速プログラムにおける計算生命科学分野の研究開発にご支援賜りますようお願い申し上げます。



重点課題2事務局メンバーで最後にパチリ。今までありがとうございました。(上:左から加藤、矢留、角田、伊藤 下:左から鈴木、神内、ゲノモン、富安)



文部科学省 ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」)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

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

■ 問い合わせ先

国立大学法人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
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 事務局

〒108-8639 東京都港区白金台 4-6-1 TEL : 03-5449-5615 FAX : 03-5449-5442

E-mail : icls-office@hgc.jp URL : <http://postk.hgc.jp/>



ポスト「京」重点課題は、国家基盤技術としてスーパーコンピュータ「京」の後継機となる「富岳」を活用し、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に戦略的に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指す文部科学省の事業です。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」は、東京大学医科学研究所を代表機関として、スーパーコンピュータ「富岳」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、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。