

Access map



独立行政法人理化学研究所
HPCI 計算生命科学推進プログラム 企画調整グループ

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
理化学研究所計算科学研究機構内
TEL: 078-940-5692 FAX: 078-304-8785
E-mail: senryaku1@riken.jp

<http://www.scls.riken.jp/>



より良い 健康のために

私のカラダをシミュレーション



HPCI 戦略プログラム 分野 1

「予測する生命科学・医療および創薬基盤」

代表機関 独立行政法人理化学研究所



「京」はいったい
何ができるの？

！ 生命科学をコンピュータで 解き明かします

生命現象は、誰も見ることが出来ないとても小さな世界の出来事が積み重なることで起こっています。わたしたちは、物理や化学、数学を用いて生命現象をモデル化し、「京」の中で**生命現象を再現します**。「京」の出現によって、この挑戦的な課題が可能になりました。

予測する生命科学？

「京」のパワーを使って、分子から細胞、さらには個体までの生命現象を解き明かし、将来に向かって新たな発見的なシミュレーションを行う生命科学です。

※「京」

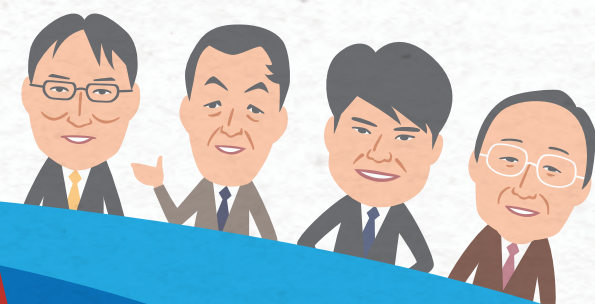
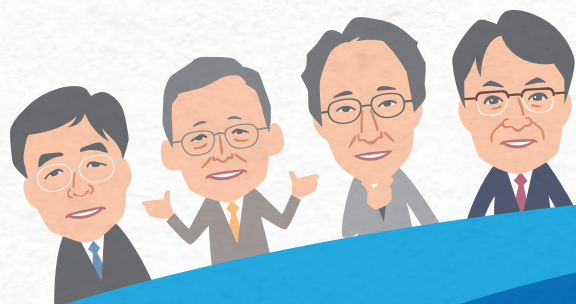
1秒間に1京回の四則演算ができるスーパーコンピュータです。この性能を活用し、膨大で精密な計算が必要なシミュレーション（模擬実験）を行うことが可能になりました。遺伝子情報の解析では「百億ピースのジグソーパズル」を「京」で解きます。



研究が進むと 私たちの未来はどう変わるの？

新しい薬や治療法の開発に計算生命科学が大きな役割を果たすことで、病気を治療するばかりでなくひとりひとりの健康状態を正確に知り、病気をあらかじめ予防することができるようになります。

人々がより健康で より豊かな生活を送れるよう
「京」を使って、複雑な 生命現象の解明に挑戦します



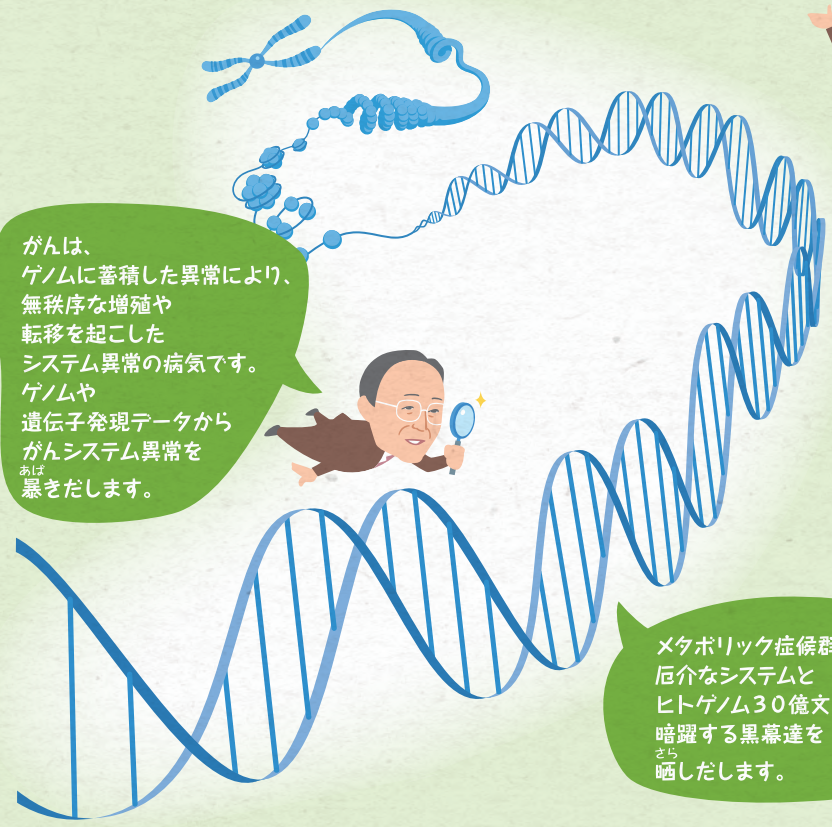
1 クローズUP



ゲノム情報など、大量の生命科学データを高速に解析し、個別化医療の進展に寄与します。そこでは、最適な薬の量の決定、副作用の回避、ワクチンの設計など医療現場からの要望に応じていきます。



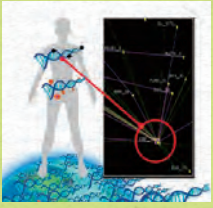
がんは、ゲノムに蓄積した異常により、無秩序な増殖や転移を起こしたシステム異常の病気です。ゲノムや遺伝子発現データからがんシステム異常をみれば暴ぞだします。



メタボリック症候群などの厄介なシステムとヒトゲノム30億文字の間で暗躍する黒幕達をさら晒します。

? 「京」を使うとどうなるの? 「個別化医療が近くなる!」

個別化医療とは、個人それぞれの体質や生活習慣、そしてゲノム情報などを活用し、個々人に最適な治療・健康管理を行うことです。患者さんにとって安心安全な無駄のない治療が受けられるようになると期待されています。個別化がん医療をめざしては、最適ながんの予防、診断、治療法を開発するため、世界中の研究者が協力して、がん組織のゲノムを網羅的に解析しています。「京」はそのゲノム情報の解析にも活躍していきます。



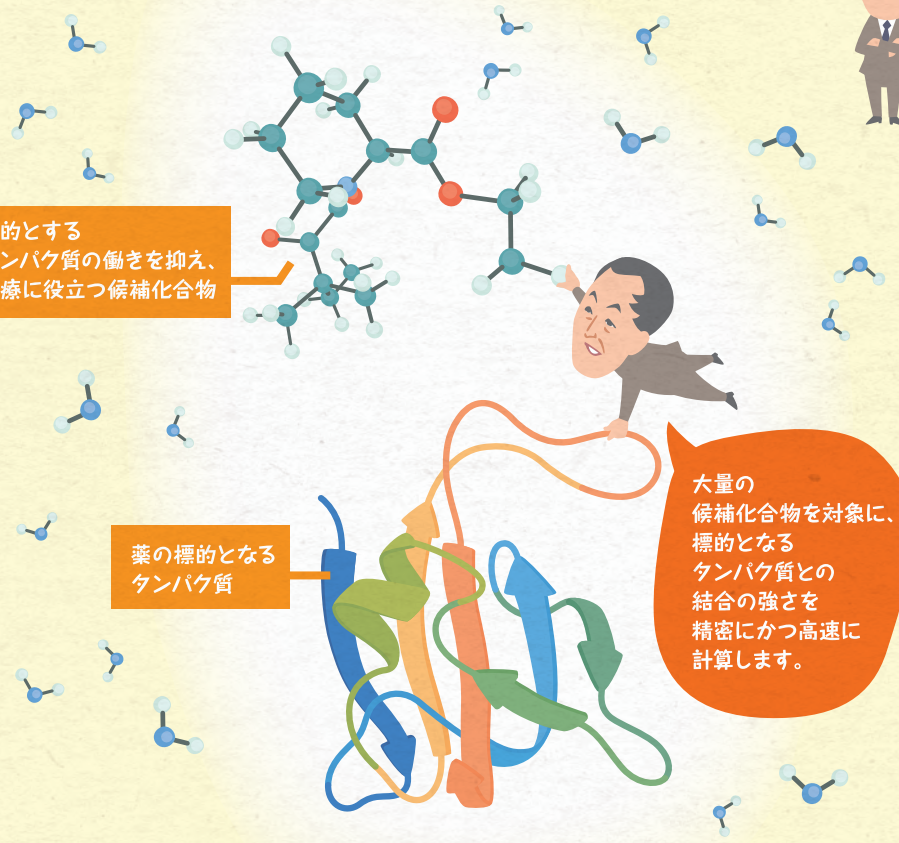
2 クローズUP



良く効き、副作用や身体への負担が少ない薬を創りたいという思いを胸に、病気のメカニズムを知り、新しい薬をデザインしています。薬づくりのプロセスを大きく加速します。



標的とするタンパク質の働きを抑え、治療に役立つ候補化合物



薬の標的となるタンパク質

大量の候補化合物を対象に、標的となるタンパク質との結合の強さを精密にかつ高速に計算します。

? 「京」を使うとどうなるの? 「開発プロセスの初期段階を加速!」

薬の候補化合物と標的タンパク質との結合の強さを推計するのに、市販のPCだと300日かけてようやく化合物1個、でも「京」を最大限に使うと1日で250個も予測できます。わたしたちは、特に薬の開発プロセスの初期段階を加速させます。



3 クローズUP

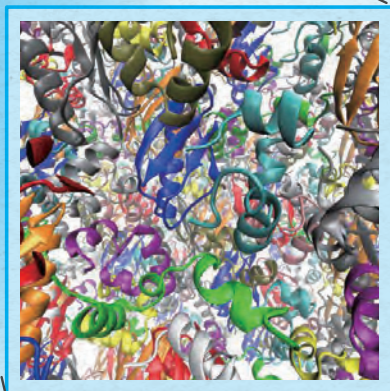


分子シミュレーションの計算手法の開発と応用研究に取り組み、これまで到達することができなかった細胞スケールの生命現象を解明し、将来的な創薬・医療のデザインの実現を目指します。



細胞の中は満員電車みたいにぎゅうぎゅうです。タンパク質は苦労しながら働いています。

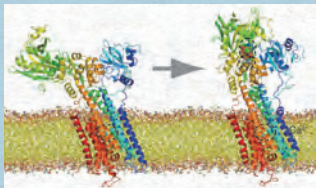
細胞環境下でのタンパク質の長時間の振る舞いを計算し、細胞機能との関係を明らかにしていきます。



細胞の中の多くは水ですが、タンパク質なども30%以上を占め、ひしめきあっています。

? 「京」を使うとどうなるの? 「細胞をあるがままにシミュレーション!」

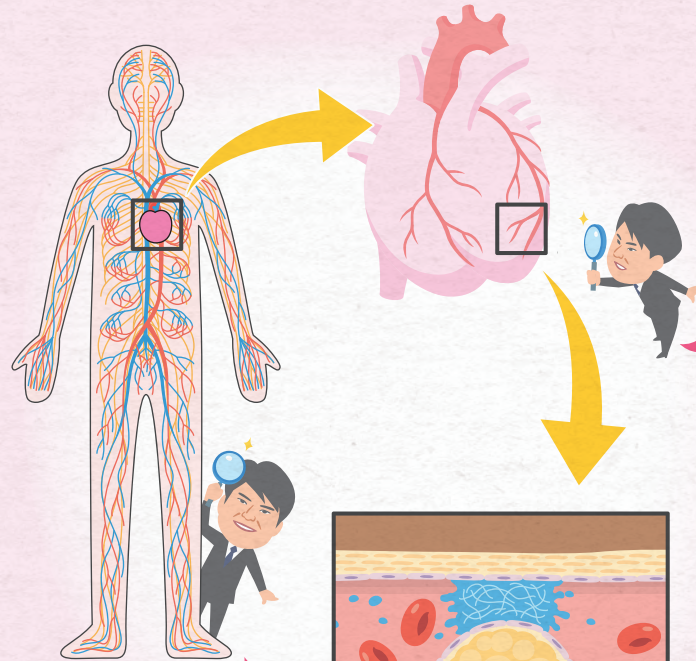
病気の多くはタンパク質の機能不全ともいえる現象がきっかけで起こります。そのため、最近の実験の多くは細胞内でのタンパク質の振る舞いをあるがままに研究しようとしています。一方、これまでの小さな計算機では到底そのような条件での計算はできません。単純化し、溶液の中で孤立した1つのタンパク質の計算をせざるをえませんでした。「京」を用いることで初めて「細胞環境下」でのタンパク質の計算が可能になりました。



4 クローズUP



これまで別々に研究されてきた循環器系、筋・骨格系、脳・神経系のシミュレーションを統合し、心臓疾患や運動機能障害などの複雑な発症過程を解明し、最適な個別化医療を支援します。



心筋細胞のレベルから心臓の機能をありのままに再現する心臓シミュレーションを行い、ミクロレベルの異常と心臓の病気の関係を解き明かします。

さらさら流れていた血液が、病気により固まりはじめ、血管が詰まるまでの過程を分子や細胞のレベルから解き明かします。

人の体は全てが統合され、協調して働いています。



? 「京」を使うとどうなるの? 「からだをまとめてシミュレーション!」

今までも人の体を構成する脳・神経や筋肉・骨、心臓、血管といった個々の要素を計算機を用いて研究する例はありました。「京」では、それらをばらばらではなく、まとめて研究することが出来るようになりました。わたしたちは、医療従事者と共同して新しいタイプの医学を作りあげようとしています。この研究の成果によって、治療法の詳細な検討や治療後の状態の正確な予測を行うことを目指しています。

