

分科会D 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」

モデレータ: 高木 周(理研)

パネリスト: 後藤信哉(東海大), 大島まり(東大),
石井信(京大), 杉田有治(理研)

- ・計算生命科学: 分野融合的
(医学系, 生物系, 物理系, 化学系, 工学系など)

研究教育拠点: 様々な分野の研究者が集まる機関

拠点はどうかあるべきか, 何ができるか



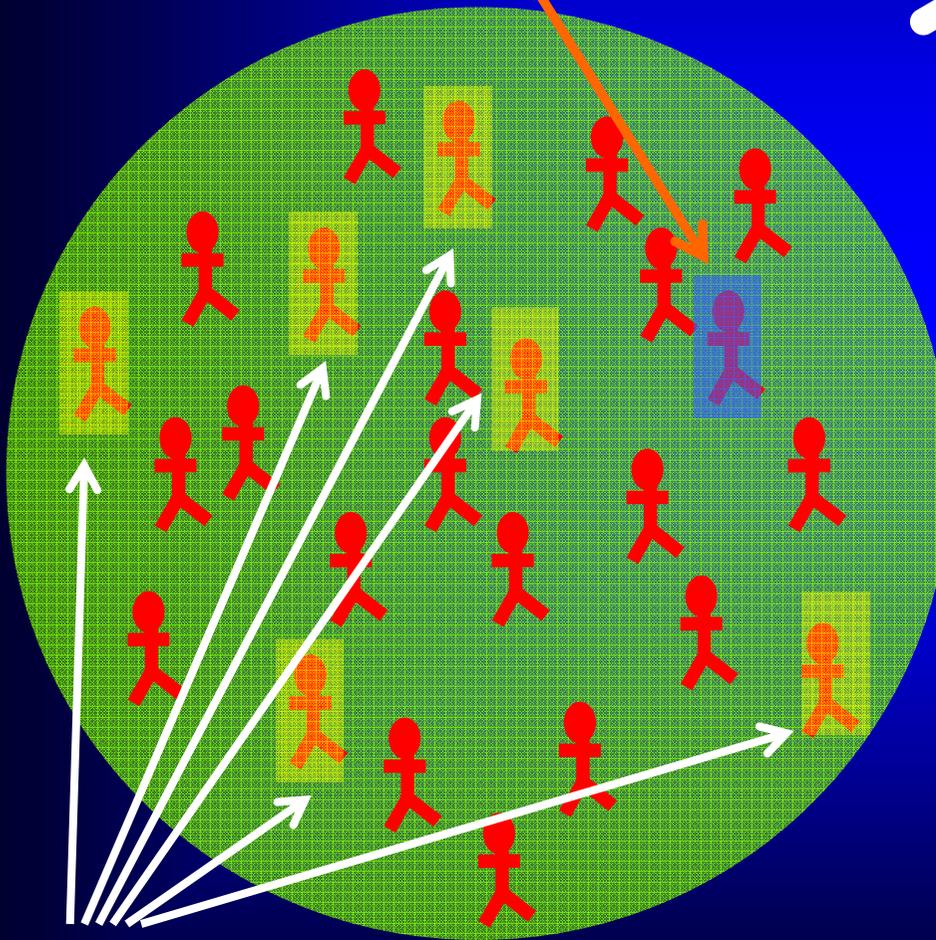
計算生命科学の分野はどうかあるべきか, 何ができるか

過去の経験を数値化して整理する「現在の医療」の理論体系
では、イベントを起こす「個人を予測すること」は不可能です

後藤信哉(東海大)

非介入下

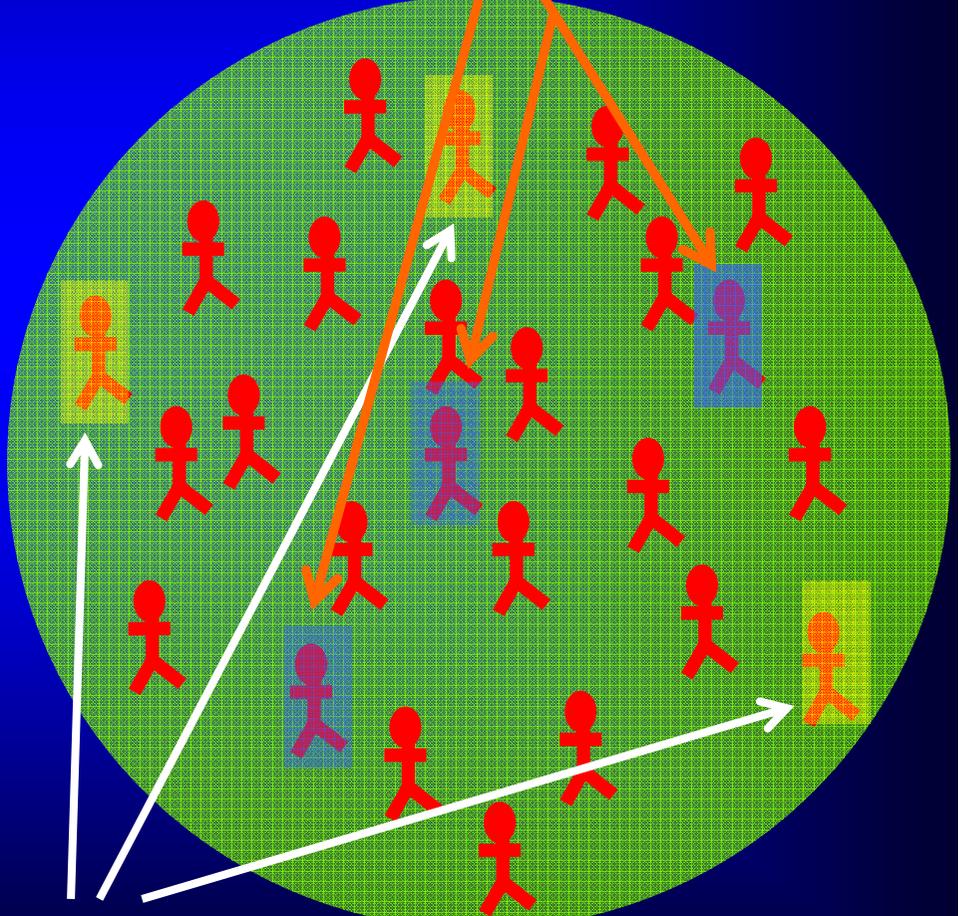
出血イベント(1/25)



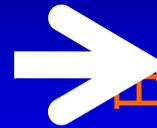
血栓イベント(6/25)

医療介入下

出血イベント(3/25)

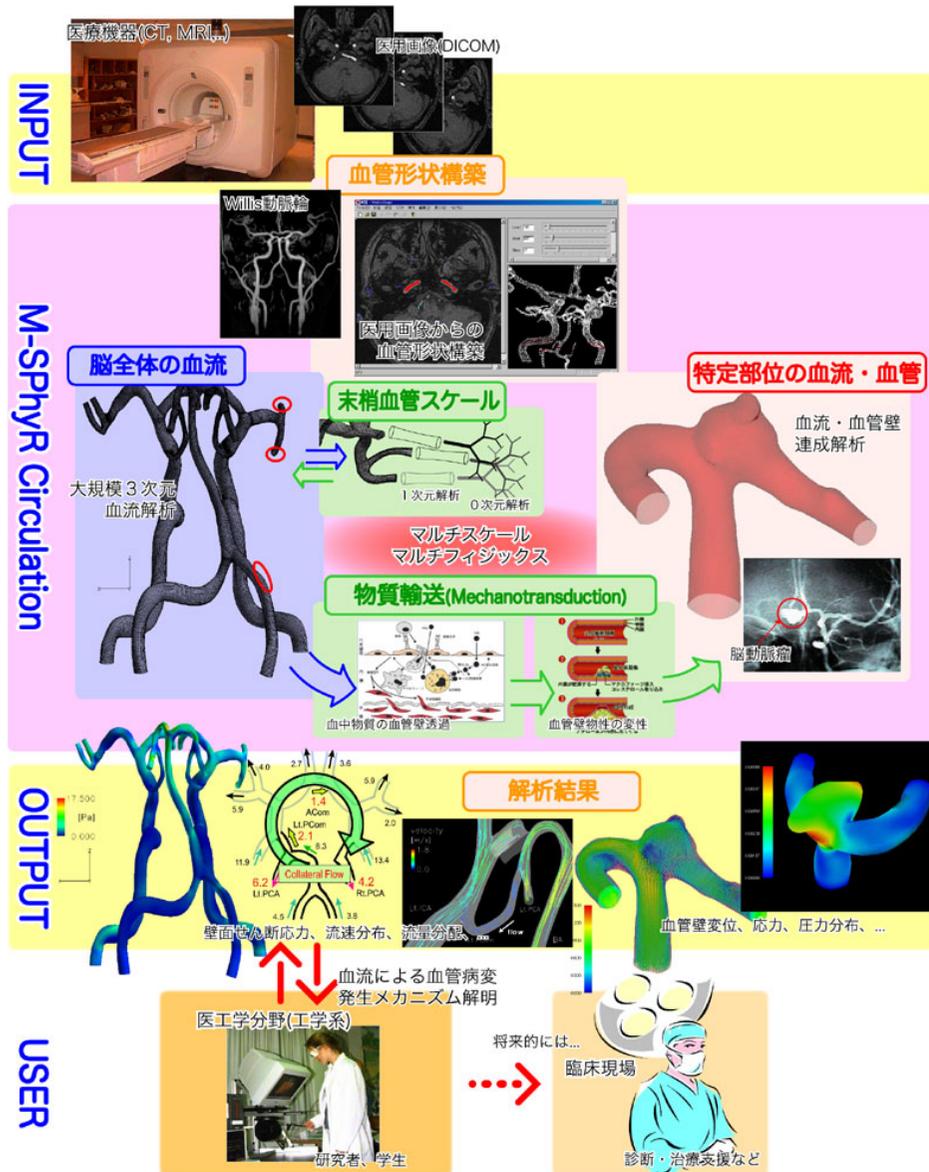


血栓イベント(3/25)



脳循環系シミュレーション

大島まり(東大)



- ・ MRI/CTなどの診断機器の医用画像に基づき(**Image based**)、実際の血管形状を作成
- ・ 患者個人個人の血管形状を考慮した**Patient specific**血流解析
- ・ ミリオードの太い動脈から、毛細血管の効果まで含めた**Multi-Scale**な解析
- ・ 脈動に伴う血管壁の移動、血流による血管内物質の壁面透過など脳血管における**Multi-Physics**の解析

脳動脈瘤や動脈硬化症などの循環器系疾患の原因となる血管病変のメカニズム解明

次世代スパコンによるさらなる飛躍を目指して

- ・ 循環系一細胞間の統合
例：力学的刺激に対する細胞の応答の数理モデリング
- ・ 次世代スパコンの特長を活かした計算手法

データをつなぐ、モデルをつなぐ(階層を超える)

石井信(京大)

データ統合・
情報表現・こころの科学

ライフサイエンス分野を超えて、
社会科学全般に貢献

分子から行動までの統合



超大規模実時間
シミュレーション

脳のネットワーク異常と考えられる
うつ病や統合失調症などの神経疾患の理解

(実験・シミュレーション)
各階層のデータ



大脳皮質



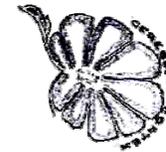
脳幹



大脳基底核

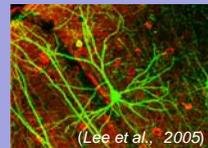


視床

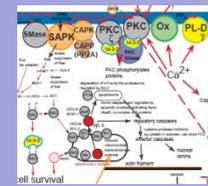


小脳

脳領域の統合



神経細胞

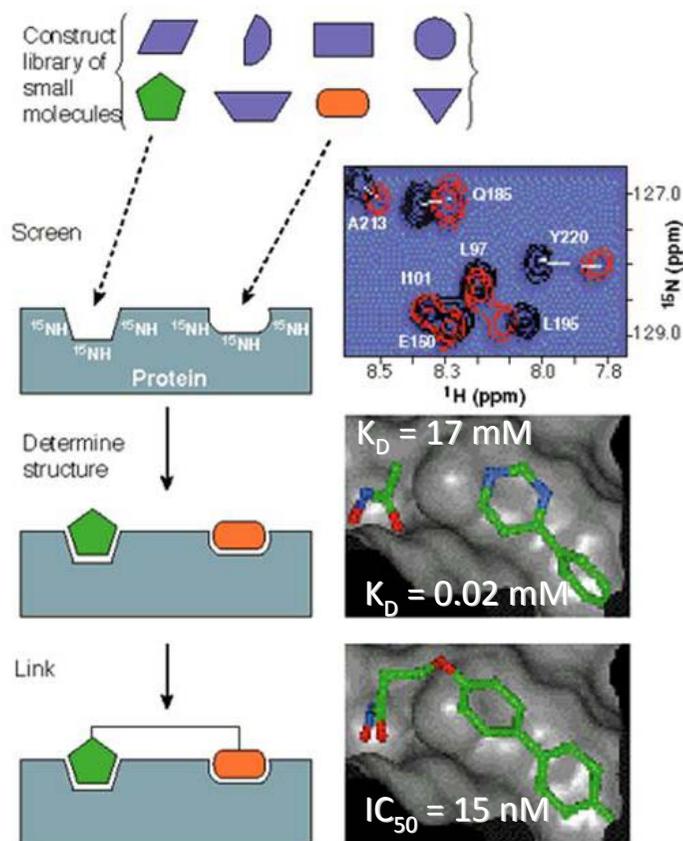


分子シグナル伝達

複数の脳領域を統合してリアリスティックなシミュレーションを行うには Exa-PLOPS級以上の計算能力が必要
それとは別に、データの集積は必須

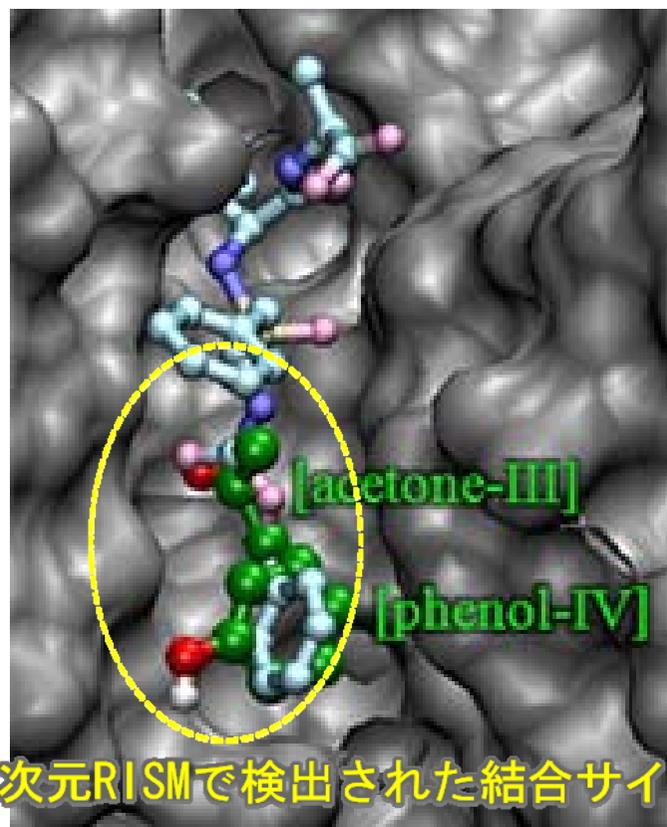
研究開発例: 統計力学理論に基づく阻害剤の予測

Fragment-based drug design (FBDD)
High-throughput screeningに代わり
と期待される新しいアプローチ



P.J. Hajduk et al. Science (1997)

3D-RISM理論に基づくリガンド・マッピング
統計力学に基づく分子液体の積分方程式
理論の創薬への応用
(GCナノ(平田:分子研)との連携研究)



T. Imai et al. JACS (2009)

計算生命科学分野の問題点

問題点1

様々な分野の研究者が集まっている分野であり、
基礎知識の共有が十分行われていない。

解決策

- ・使っている言葉の統一と概念の共有が重要。
一> 同じ問題に取り組み多くの議論を交わしながら互いの知識の摺りあわせをする。

問題点2

医師の多くがシミュレーションに大きな期待をしているわけではない。

- ・シミュレーションによる新薬の開発などが行われればインパクトは大きいがなかなか難しそう.....

解決策(?)

- ・外部に対する広報活動の充実。
得られた重要な知見を外部にわかりやすく宣伝していく。
- ・薬効などが期待されたがうまく行かなかった事例をシミュレーションにより再現することによって、医師が想定していなかった事象を予測し、新たな知見を得る。

計算生命科学分野の問題点

問題点3

従来の医学の分野は、経験に基づいた帰納的なアプローチ。

→ 新たな薬の開発などには限界が来ている

解決策

- ・経験的・帰納的医学から、演繹的予測医学へ、シミュレーションを活用した新たな医学分野の創出

拠点はどうあるべきか, 何ができるか

- ・異分野間の連携の促進

使っている言葉の統一と概念の共有を促す組織の形成もしくは人材の配置・育成

- ・外部へ情報発信する機関の設立.

必ずしも社会的インパクトの大きな成果でなくても, 役立つ知見を積極的に外部に伝える.

- ・従来, 大規模シミュレーションが用いられていない分野への展開を積極的に推進