

生命科学の新たな時代を切り拓いた 計算生命科学

1665年 フック 『ミクログラフィア』 (生物は細胞からなる)

1687年 ニュートン 運動方程式

1859年 ダーウィン 『種の起源』 (生物は進化する)

1865年 メンデル 遺伝の法則

1953年 ワatson、クリック DNAの二重らせんモデル

1958年 ケンドル タンパク質のX線結晶構造解析

1977年 サンガー DNA塩基配列決定法

2005年 次世代シーケンサー

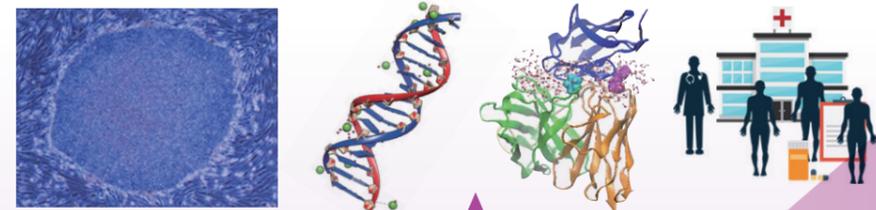
2006年 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 『次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの開発』

物理学と化学に基づいて生物学を理解する
生物はDNAやタンパク質などの分子からできており、それらの分子が物理学や化学の法則にしたがって変化することで、生命活動が営まれています。現在では当たり前のこの考え方は、20世紀後半になってようやくできあがりました。その後、DNAの塩基配列やタンパク質の構造を調べる方法はどんどん進歩し、それらの結果をもとに生命現象を理解できるようになりました。

遺伝の法則からDNAの二重らせんへ
生物学の世界に「実験」を持ち込み、初めて法則を見出したのはメンデルです。彼が発見した「遺伝の法則」は、90年近く経ってワトソンとクリックの「DNAの二重らせんモデル」の発見につながりました。同じころ、タンパク質がどのような形をしているかが初めて解明されました。やがて、細胞の中ではDNAの情報をもとにタンパク質がつくられていることや、タンパク質の形と働きとの間に密接な関係があることがわかってきました。

2021年 2021年ごろの供用開始を目指して スーパーコンピュータ「富岳」を開発中

再生医療・生殖医療 ゲノム創薬・ゲノム医療 革新的創薬



「富岳」(ポスト「京」)でできるようになること
「富岳」では「京」より高い計算性能により大規模・高精度のシミュレーションが可能です。バイオ医薬品の開発やゲノム情報から新薬候補を探索するゲノム創薬を実現し、それらの技術により、患者個人に最適なゲノム医療、さらに再生医療、生殖医療に貢献します。

2019年5月
ポスト「京」の名称が「富岳」に決定
スーパーコンピュータ「京」の後継機として、「京」で培った技術・人材、そしてアプリケーションの蓄積を最大限に活用します。

2016年~
フラッグシップ2020プロジェクト
ポスト「京」重点課題1
『生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築』

ポスト「京」による次世代計算創薬
ポスト「京」で、超高速分子シミュレーションを実現します。副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害のみでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬の実現を目指します。

2012年 スーパーコンピュータ「京」

バクテリア細胞質の全原子分子動力学シミュレーション

ポスト「京」を目指す大規模生体分子シミュレーションの例 HPCI戦略プログラム分野1より

計算科学と生物学
ヒトの細胞1個をとっても、その中には30億もの塩基からなるDNAと、数多くのタンパク質が含まれています。DNAやタンパク質を調べれば調べるほどたくさんのデータがたまり、人間の手には負えなくなってきました。そこで、現在では計算科学の「データ解析」という方法が生物学に使われるようになりました。データ解析は、スパコンを使って、膨大なデータの中から意味のある情報を引き出す方法です。一方、分子の振る舞いや血流の流れなどの生体内の現象を物理学と科学の法則、さらには数学に基づいて理解するために、スパコンを用いた「シミュレーション」も広く使われ始めました。

2011年 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』
スーパーコンピュータ「京」を中心としたHPCIを最大限に活用することによって、戦略的に生命科学の研究分野において画期的な成果を産み出す

タンパク質の動きのシミュレーション 血流のシミュレーション がん再発の鍵となる遺伝子を明らかに

マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ UT-Heart
HPCI戦略プログラム 分野1より

映像 バクテリア細胞質の全原子分子動力学シミュレーション
核内混み合い環境でのヌクレオソーム、クロマチンの機能発現機構
マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ UT-Heart
<https://www.youtube.com/watch?v=2JU2LjPDrQY&feature=youtu.be>
<https://www.youtube.com/watch?v=v2s0vtvqmKc&feature=youtu.be>
<https://www.youtube.com/watch?v=tBdFv28EEq0&feature=youtu.be>

28 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

29 生命科学の新たな時代を切り拓いた計算生命科学

A History of Life Science