

○検討の経緯（補足）	・・・ 2
○重点課題・萌芽的課題について（補足）	・・・ 5
○「京」について（補足）	・・・ 30
○春の行政事業レビュー公開プロセス （平成27年6月） 資料	・・・ 67

< 重点課題（ 9 課題 ） >

社会的・国家的見地から高い意義がある、
世界を先導する成果の創出が期待できる、
ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
健康長 寿社会 の実現	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 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。	代表機関： <u>理化学研究所</u> （課題責任者： <u>奥野 恭史・客員主管研究員</u> ） 分担機関：京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技術総合研究所 共同研究参画企業：24社
	個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者： <u>宮野 悟・教授</u> ） 分担機関：京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医科大学、岡山大学 共同研究参画企業：5社
防災・ 環境問 題	地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者： <u>堀 宗朗・教授</u> ） 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学 共同研究参画企業：1社
	観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。	代表機関： <u>海洋研究開発機構</u> （課題責任者： <u>高橋 桂子・センター長</u> ） 分担機関：理化学研究所、東京大学、東京工業大学 共同研究参画企業：7社

< 重点課題（9 課題） >（つづき）

平成28年2月10日情報科学技術委員会資料より

カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
エネルギー問題	エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。	代表機関： <u>自然科学研究機構（課題責任者：岡崎 進・教授）</u> 分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学 共同研究参画企業：17社
	革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：吉村 忍・教授）</u> 分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教学院立教大学、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所 共同研究参画企業：11社
産業競争力の強化	次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：常行 真司・教授）</u> 分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学 共同研究参画企業：6社
	近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：加藤 千幸・教授）</u> 分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、東京理科大学 共同研究参画企業：30社
基礎科学の発展	宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。	代表機関： <u>筑波大学（課題責任者：青木 慎也・客員教授）</u> 分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、自然科学研究機構国立天文台、千葉大学、東邦大学、広島大学 共同研究参画企業：1社

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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

ポスト「京」で可能となる長時間ダイナミクス計算により、**副作用因子を含む 多数の生体分子の機能を予測し、有効性が高く、さらに安全な創薬**を実現

(2) 有効性の観点

創薬関連ビッグデータ(疾病、副作用等に関わるタンパク質群や医療情報)や最先端計測データを活用し、**製薬企業およびその関連団体との密接な連携体制**で新たな創薬基盤を構築

(3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」をフルに活用した生体分子シミュレーションにより、**創薬計算の大幅な加速を実現**。さらに創薬の**阻害から制御への革新**(タンパク質の機能阻害から生体分子システムの制御へ)を目指す。

内容の詳細

単純な阻害剤をめざす
創薬ターゲットが枯渇

生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)のダイナミクスを考慮した機能制御をめざす創薬が必要

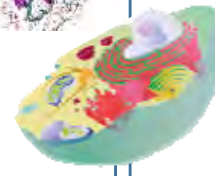
創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、**薬剤による制御対象を網羅する**

ポスト「京」を駆使する分子シミュレーション法を開発

ポスト「京」を駆使して、多数のタンパク質の創薬計算を大幅に加速、さらにそれらのダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用を予測し、**機能制御をする薬剤を設計**

細胞環境を考慮したシミュレーションを行うことで、細胞に対する**最先端計測実験**と定量的に比較する

創薬関連ビッグデータ



ポスト「京」利用の必要性

今後の創薬には、ポスト「京」ではじめて可能となる、疾患に関わる多数のターゲットからなる生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)の同定とそれらの長時間シミュレーションによるダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用予測が不可欠

ポスト「京」分子シミュレーションによって、細胞環境における長時間シミュレーションがはじめて可能となり、先端計測機器からもたらされるデータに対応する情報を与えることで、細胞機能発現の機構がはじめて原子レベルのモデルから明らかとなる

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

生体分子システムの動的構造予測等に約45日
創薬の結合自由エネルギー計算に約35日(10万ケース)



期待される成果・波及効果

多数タンパク質を含んだ網羅的なターゲットシステムの選択、膨大な計算量による超高精度相互作用予測、単純な機能阻害ばかりでなく、副作用因子を含んだより複雑な**機能制御**による有効性の高い創薬を可能にする。これによって、**創薬プロセスを革新し、製薬産業の活性化に貢献する**。

様々な生体分子システムの**最先端計測データ**(SACLA, SPring8等の大規模施設からの情報や、一分子計測情報などのin-house実験によるものなど)に対して、ポスト「京」を用いた分子シミュレーションは原子レベルでそれら実験情報に対する**機能発現モデル**を提供することができ、生体分子システムの理解、予測、操作に大きく貢献することができる。

重点課題 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

● 重点課題 概要： **ポスト「京」による創薬イノベーションを目指す**

- **長時間の分子シミュレーション技術の開発** ⇒ 病気の原因分子と薬の候補物質が作用する全ての様子が予測できるようになり、より効果的な新薬の開発が可能になる。
- **大規模分子システムのシミュレーション技術の開発** ⇒ 細胞内環境などの多数の分子からなる生体分子システムの創薬シミュレーションを実現し、より安全な医薬品開発を可能にする。
- **ポスト「京」を用いた革新的創薬計算基盤の構築** ⇒ 製薬会社等の利用による産業促進

● **ポスト「京」で出来るようになる事**

- 科学的な観点：**構造生命科学の革新**－ポスト「京」によりミリ秒のタンパク質やDNAの動きが解析できるようになる。
（「京」ではマイクロ秒であった）
- 社会的な観点：**医薬品開発の革新**－ポスト「京」により、がん、認知症、精神疾患、希少疾患など今まで困難であった薬の開発に新たな道を拓く。さらに、薬の副作用を予測したり、個人個人の体質に最適な薬を選択することが可能になる。
- 経済的な観点：**新薬開発による日本経済の牽引**－医薬品開発の期間短縮（約2年間短縮）と費用削減（一品目当たり約200億円削減）

