

想定されるポスト京の成果（重点課題 創薬）

京以前（過去）

従来の汎用コンピューターでは、標的タンパク質と薬の候補化合物の結合シミュレーションを高い精度で行うことは、極めて困難であった。

このため、新規骨格化合物の設計や、有効性の指標となる標的タンパク質との結合予測を行うシミュレーションは、創薬化学者による探索研究実験の補助的役割にとどまっていた。



実験に頼る創薬

京時代（現在）

「京」では特定のタンパク質に対する大量の高精度な結合予測が可能となり、効率的な薬剤探索が可能になった。

これにより、いまだ合成されなかった多くの新規薬剤の効率的な計算スクリーニングが実現し、その結果を基に、製薬会社が新規薬剤を合成し、標的タンパク質との結合アッセイを行うという、民間企業との連携が実現できた。



シミュレーションにより
候補の選定を実現

ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では多数のタンパク質、多数の結合箇所について高精度な結合予測が可能となる。細胞環境も取り入れた大規模で長時間の生体分子シミュレーションにより、生体分子システムの大規模な構造変化を含めた動的構造を明らかにする。薬剤の結合によるタンパク質の機能制御まで含めた効率的な薬剤探索が可能になると期待される。



創薬におけるタンパク質の機能阻害から
機能制御への革新

想定されるポスト京の成果（重点課題 生体シミュレーション）

京以前（過去）

これまでは、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、ばらばらに計算して研究を行っていた。粗いシミュレーションであったため、成果の応用は限定的であった。



（血管の硬さが分かる高機能血圧計への応用例）

器官毎の粗いシミュレーションを実現。

京時代（現在）

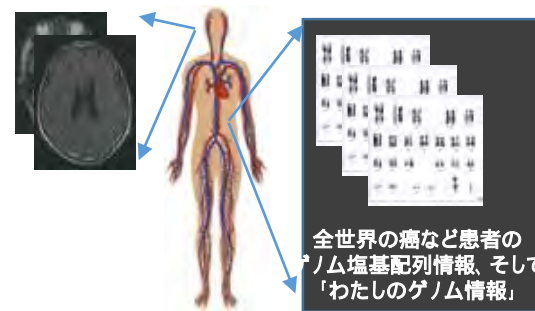
「京」を用いて人の体を構成する心臓や血管のシミュレーションを連成し、分子、細胞レベルから精緻に計算できるようになった。これにより、実際に医療機関との連携により、実際に治療への応用を進めているところである。



分子、細胞、組織、器官の連成を行い精緻なシミュレーションを実現。

ポスト京時代（将来）

ポスト「京」を用いると、ビッグデータ処理が可能となり、膨大な量の臨床データやゲノム情報から、個人ごとの健康・疾患の予測が可能となる。これにより、疾患の早期発見・早期治療、また、健康寿命の延伸に貢献できる。



全世界の癌など患者のゲノム塩基配列情報、そして「わたしのゲノム情報」

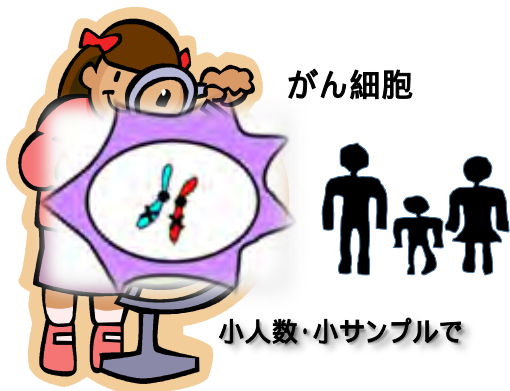
個人医療への貢献が可能に。

想定されるポスト京の成果（がんの個別化・予防医療支援）

京以前（過去）

個々の研究では、数十検体のがんゲノムの2%ほど(エクソーム)を解析し、主要ながんのドライバー遺伝子と変異を同定。抗がん剤応答遺伝子ネットワーク解析は1000遺伝子程度まで。全世界で実施された全ゲノムシーケンス解析数は2桁程度。

局所的にしか見えなかった



一部の主要ながんの原因遺伝子と変異を抽出。

京時代（現在）

ヒト全ゲノム解析が1000ドル。1検体の全がんゲノムシーケンスデータの解析と全遺伝子ネットワーク解析を平均1時間で実現。ゲノム異常や遺伝子制御異常のカタログができ、医療への応用が展開中。欧米では100万人ゲノム/健康医療情報プロジェクトが始まった。

がんの全体像がやっと見えた



網羅的にがんのヘテロ性とシステム異常の本態を計算科学技術で解明。

ポスト京時代（将来）

ヒト全ゲノム解析は100ドル以下。1細胞ゲノム・RNA解析や血液・尿中のがんゲノム解析が普及。個々人のがんを時空間でとらえることが現実。ゲノム関連情報と臨床データからなるビッグデータ解析やがんの進化シミュレーションで、1日平均数千検体規模の統合解析を目指す。

個々人のがんがわかる！

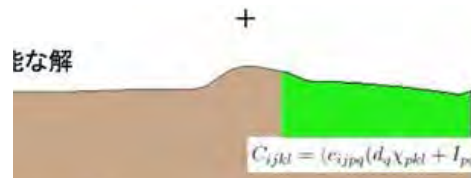


個人ごとのがんの予防と治療戦略の支援を実現。

想定されるポスト京の成果（重点課題 地震・津波）

京以前（過去）

技術的指標としての地盤増幅計算、理学・工学の地震被害予測の連成により、経験則に依存した地震や津波による被害の予測にシミュレーション技術を導入するための分野別技術開発・部分的な連成技術開発を実現した。

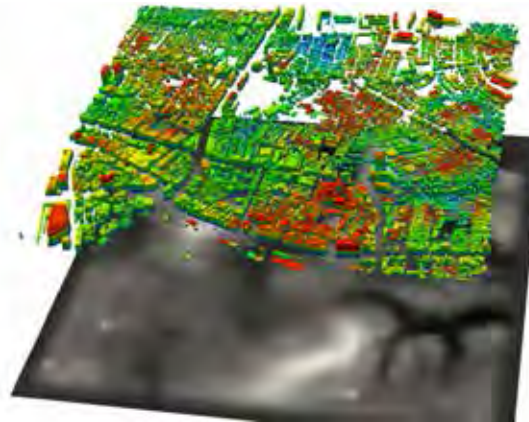


* 地震波動計算と都市構造物連成シミュレーション高度化のための階層型解析

京時代（現在）

技術的指標としての地盤増幅計算、理学・工学の地震被害予測の統合により、地震・津波による被害予測のうち、物理シミュレーション(理学・工学分野)の統合を実現した。

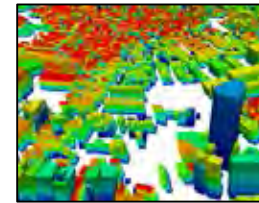
[SC14 Gordon Bell prize finalist](#)



* 3次元地盤構造と各構造物の特性を反映した複雑な地表面・構造物応答を計算
(100億自由度・3万time step)

ポスト京時代（将来）

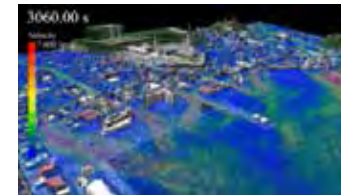
技術的指標としての地盤増幅計算、理学・工学・社会科学の地震被害予測統合により、物理シミュレーションによる被害予測の分解能向上により、避難・交通・復旧等の社会科学の領域へ



構造物応答計算



エージェントシミュレーション



津波遡上計算