

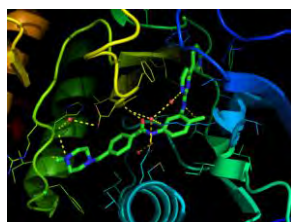
今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

創薬・医療

画期的創薬・医療技術の創出

従来の研究

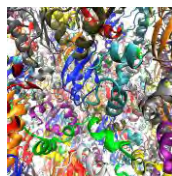
- 小規模なデータ処理
- 個別分野において固有のスケールが進展
- 単純な脳回路等のシンプルなモデル



タンパク質と薬の結合

今後の計算科学からのアプローチ

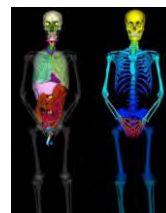
- DNAシーケンサーから得られる大規模データによる遺伝子ネットワーク解析
- 細胞環境下での創薬
- 幅広い時空間にまたがる階層でのモデルの連成
- モデルの大規模化・高精細化
- 詳細な脳神経回路シミュレーションとデータ同化



細胞環境下での創薬



臓器の精密シミュレーション(京)



全身スケールシミュレーション

社会への貢献

- 個人の遺伝情報に基づき患者個々人に最適な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現
- 新薬開発の短期化、低コスト化
- 負担が小さい治療の実現による患者の生活の質の向上、早期社会復帰による社会の活性化、医療費の低減

今後のスーパーコンピュータがもたらす莫大な計算能力が、神経系や細胞の詳細なシミュレーション、幅広い時空間にまたがるシミュレーション、そしてそれらのリアルタイムに近いデータ同化²などさまざまな面で生命分野の発展に大きく寄与することは間違いなく、ひいては画期的創薬・医療技術創出の重要な科学基盤となり得るものである。

創薬・医療分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

² 異なった観測・実験データと数値モデルを高度に融合する方法の一つ。