

ライフサイエンス戦略分野

～バイオスーパーコンピューティングの新時代に向けて～

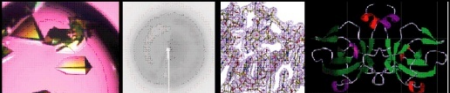
平成21年1月28日

独立行政法人 理化学研究所

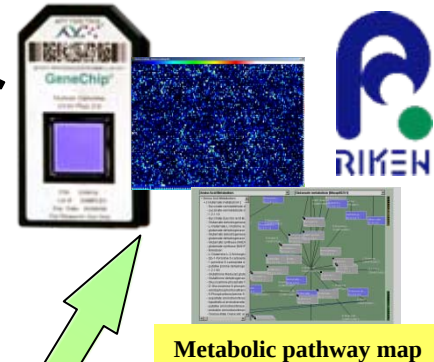
茅 幸二、姫野龍太郎

泰地真弘人、笹井芳樹

1. なぜライフサイエンスか

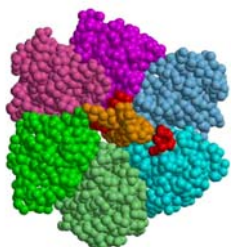
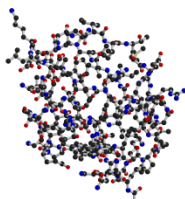
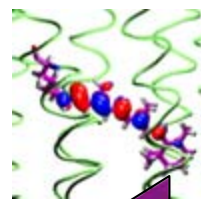
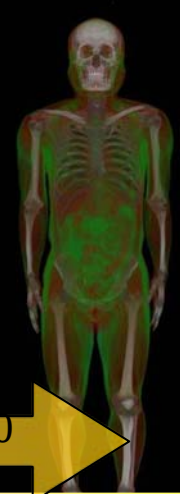
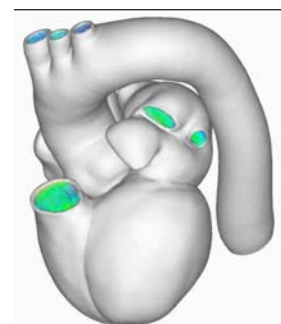


1)サイエンスにおけるインパクト



Metabolic pathway map

- 生命現象は最も複雑な解き明かすべき課題
 - 複雑で美しい振舞いを示す**超**多体系多階層問題
 - 分子のレベルすら、量子化学計算、分子動力学計算、粗視化モデルなどの複数の階層で取り扱う必要がある
 - 分子・細胞・組織・臓器の多階層:精緻な粗視化によるモデル化が必須
 - 個々の要素は急速に解明が進展
 - ライフサイエンスでの課題は、個々の要素現象の発見・理解から、互いに関連する複雑な現象の統合的かつ定量的な理解へと進化
 - 世界的に計算科学的アプローチの必要性が叫ばれている
 - 生命の本質と、個々の生命の違いの両面を扱う必要性
- 現象を記述する生物学から、新たな現象を予測できる生物学へ
- 生命現象の統合的理解へ
 - この挑戦は21世紀のサイエンスの最重要課題



10^{-8}

10^{-5}

$10^{-3 \sim -2}$

10^0

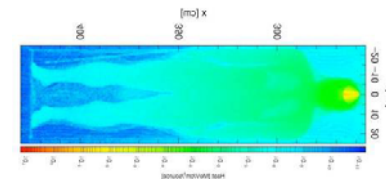
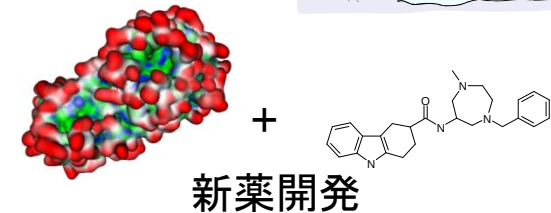
Micro

Meso

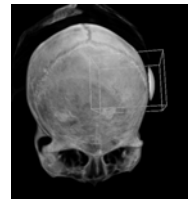
Macro

2) 社会的インパクト

- 高齢化社会の到来と医療の質の向上が期待
- 生命現象の統合的理解と、**予測性**によって
 - 病気の理解が進み、診断・治療に貢献
 - 健康を維持するための生活、機能性食品や補助食品の開発
 - 医薬品の開発
- 従来からある**医工学的シミュレーション**技術を発展
 - 重粒子線治療、高集積超音波治療
 - 内視鏡手術、血管内治療
 - 事故損傷の軽減・防止
 - 従来のダミーモデルから、筋骨格・血管・内臓を備えた高精密人体モデルによる衝突シミュレーション
 - 各種保護具の設計、リハビリや補助具の設計検討



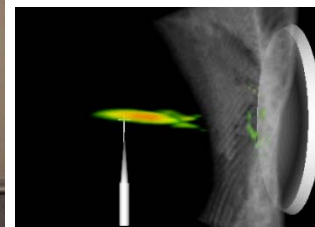
重粒子線治療



高密度超音波
治療装置



血管内治療



3) ライフサイエンス分野と他の研究分野の比較

- 計算シミュレーション
 - ミクロ: 原子・分子スケール、マクロ: 臓器・全身スケールでは基礎方程式が存在、この分野を中心にこれまで発展
 - 生命現象の根幹を担う細胞での現象では、基礎方程式がまだない。特に発生・分化・病気・免疫・進化など、生命現象は未だ神秘的
- 実験研究
 - ハイスループット実験機器、遺伝子組み換え技術、蛍光技術、一分子イメージング、次世代超高速シーケンサーなど実験技術が急速に進歩
 - 生命現象の個々の要素は急速に解明が進んでいる
 - 一方で、複雑に絡み合い、隠れた代替機構のある現象を理解し、予測するためには計算科学的手法が切望されている
- 他の分野と比較すると
 - ライフサイエンス全般では、これまで計算科学の応用範囲は限定的
 - しかし、有望な新規応用問題が多数
 - 世界中で同じ状況、今取り組めば日本が世界をリードできる分野

2. ライフサイエンス分野における 計算科学研究開発の世界の現状

1) 世界的な研究の中心は

- 三極：アメリカと欧州（＋豪州、ニュージーランド）、日本
- アジアでは中国・韓国・台湾・シンガポール、インドが台頭
 - アメリカ：DoE、NIH、DoD、民間企業（ベンチャー、製薬企業）が主、DoEが基礎科学（生物学＋計算科学）、NIHが医療を担当するため、互いの協力は希薄。計算科学と医療をつなぐ動きがない。
 - 欧州：EUがスポンサーとなり、IT技術を医療に生かす取り組みを推進。一例：VPH(Virtual Physiological Human)、個別患者の治療が目標。大学・医療機関・製薬企業・医療機器メーカーが参加、マッチングファンド、5年で数百億円規模。脳科学ではスイスがBlueBrainプロジェクトを推進。世界をリード。



Blue
Brain
Project



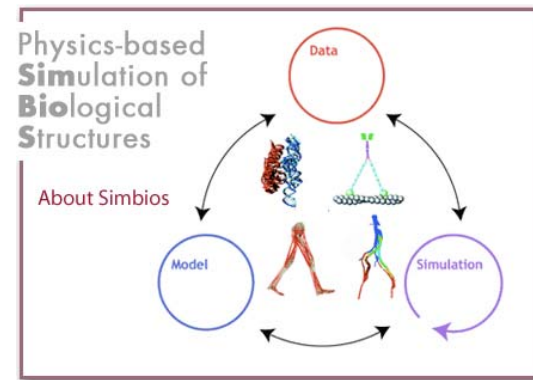
SciDAC

Scientific Discovery through Advanced Computing



2) 海外での研究開発の今後の方向

- 世界的に取り組まれているのは
 - タンパクの構造や変化などの解析
 - 大量の実験データに基づく多次元因子解析など
- 現在の研究開発でホットな話題はマルチスケール
 - NIHもEUでも二つ以上のスケールをつなぐ研究開発にファンディング
 - 欧米では医療機関で使うことを前提に簡略化したモデル化。(脳科学では例外的にスパコンを指向)
 - 日本は方程式に忠実にモデル化し、スケールの超える試み、膨大な計算量は次世代スパコンで解消
 - 戦略分野化で、日本が世界に貢献



<http://simbios.stanford.edu/>



http://ec.europa.eu/information_society/newsroom/cf/itemdetail.cfm?item_id=3956

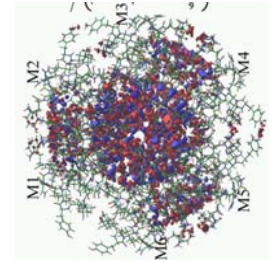


<http://www.nibib.nih.gov/Research/ProgramAreas/MathModeling>

3) 国際比較における日本の現状

• 分子スケール

- アメリカは超並列計算で先行
- 専用計算機(MD-GRAPE)による計算、粗視化モデルによる計算、全電子を入れたタンパク質の量子化学計算では日本がリード



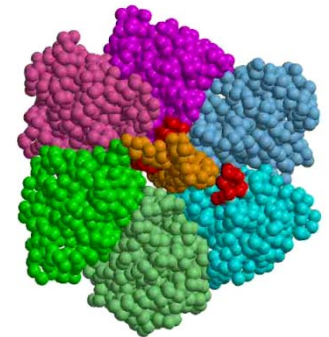
全電子計算では世界をリード(ProteinDF)

• 細胞スケール

- システムバイオロジー(E-cell等)は日本発
- 細胞群から臓器へ、分子から細胞へのアプローチはどこもこれから

• 臓器・全身スケール

- 国際的な研究開発体制が構築されつつある
- 日本は心臓モデル、健常者からの詳細人体モデルでリード



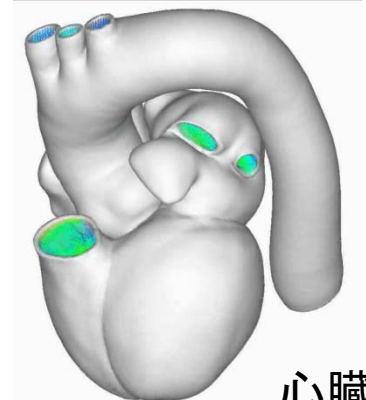
粗視化モデルによる分子モータ

• バイオインフォマティクス

- 個人の多様性と医療をつないでゆくところでは日本は優位
- 次世代超高速シーケンサー等による巨大データに直面、世界的な課題

• 脳科学

- スーパーコンピュータによるシミュレーションではBlueBrainなどが先行
- しかし、計算論的神経科学では日本が世界をリード、BlueBrainではこの観点が今は抜けている



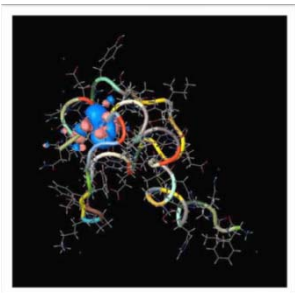
心臓

3) 国際比較における日本の現状(続き)

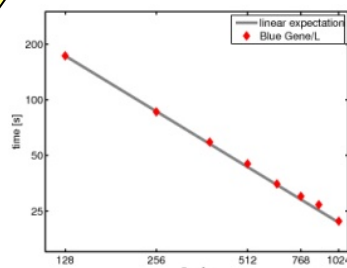
- ライフサイエンスのグランドチャレンジでは数万並列規模の計算能力をもった**ソフトウェア開発が進行中**
- 今後、**次世代スパコン**に向けた並列性能向上を加速
 - ⇒分子・細胞・臓器全身の各スケールと実験データ解析、脳神経系を統合して研究開発
 - ★世界的にも全くない試み
- 同時に行うことにより、手法やソフトを互いに利用し、開発を加速**
 - ⇒**次世代スパコンで世界をリードする絶好の好機**

ライフ分野で戦略分野をたてることが必要

チーム間の連携



全電子計算での並列性能 (ProteinDF) 2500コアまでの並列を確認



脳の局所回路シミュレーションでの並列性能 (BlueGeneLで1000並列までの速度向上を確認)

受提供	データ解析融合	分子スケール	細胞スケール	臓器全身スケール	脳神経系
データ解析融合	肺ガンと薬	ターゲットタンパクの特定	生体分子ネットワークモデル	画像処理パラメータ推定	パラメータ推定(モデル化)
分子スケール	タンパク・リガンド	代謝・膜	膜での輸送モデル	血栓形成	神経可塑性・変性・イオンチャンネル
細胞スケール	生体分子ネットワークデータ	代謝反応・膜での物質輸送データ	肝細胞	複数細胞から臓器へ・血栓形成	細胞プラットフォーム供給
臓器全身スケール	医療画像データ	データ提供・ドラッグデリバリー	血液・分泌物輸送	循環器系	全身モデル
脳神経系	神経細胞データ・局所回路データ	可塑性や神経変性に関するデータ	成長・変形モデル	運動制御臓器制御	細胞から高次機能までの一貫