

分子シミュレーションに基づく ゲノム医療・ゲノム創薬基盤の構築

理化学研究所計算科学研究センター・量子系分子科学研究チーム・チームリーダー 中嶋隆人

研究目標

本研究では、がん代表される疾患のゲノム情報を反映した分子シミュレーションを実現するための計算基盤を開発し、ポスト「京」によるゲノム医療・ゲノム創薬の促進を目指します。我々は、例えば、アミノ酸変異をタンパク質上にモデリングし、「京」コンピュータを用いて分子動力学計算を行うことで、抗がん剤との結合自由エネルギー計算 (MP-CAFE法) により薬剤耐性の反応性を再現してきました。しかしながら、計算コストの問題から「京」の計算速度では極一部の事例のみを検証することが可能でした。一方で、疾患関連遺伝子・変異は実際には膨大な組み合わせがあり分子シミュレーションを行うための対象も多岐にわたります。このため、ポスト「京」を最大限利用するための基盤を構築することが待ち望まれています。分子シミュレーションに基づくゲノム医療・ゲノム創薬の実現を目指し、結合自由エネルギー計算による薬剤反応性解析の拡張に加え、FMO法による薬剤反応性予測法の開発や、単粒子構造解析と粗視化手法を組み合わせた疾患ゲノム情報からの生体超分子モデリング手法の開発など新たな手法開発もめざします。

期待される成果と波及効果

ゲノム医療は、米国ではPrecision Medicineと呼ばれ、2015年に米国政府の最重要医療政策として掲げられています。日本でも2016年秋にAMEDを中心にゲノム医療のプロジェクトが開始されたところです。本研究課題は、これら世界的に急速に進められているゲノム医療をさらに加速する取り組みです。ポスト「京」を利用することで患者のゲノム情報を加味した分子シミュレーションに基づくゲノム医療・ゲノム創薬が初めて可能となり、医療現場の日々の診療に役立つ成果を生み出すものと期待されます。また、本研究は、兵庫県立大学、先端医療振興財団、理研リサーチコンプレックスなどの兵庫県・神戸市の大学・研究機関との連携プロジェクトであり、本研究開発成果の地元企業への波及効果も期待できます。

ゲノム医療分子シミュレーション基盤

