



課題名：「富岳」で目指すシミュレーション・AI駆動型次世代医療・創薬

奥野 恭史
(京都大学
大学院医学研究科・教授)

概要・目標

がん・心疾患・難病を中心に、分子から臓器・個体に至る複数の階層をつなぐマルチスケール生体系ネットワークのAI推論とマルチスケールシミュレーションを実現し、複雑な病態メカニズムの解明、疾患原因・創薬標的分子・早期診断バイオマーカーの同定、それらを治療する薬剤デザインを実施することで社会実装する。

実施体制・関係機関・研究内容

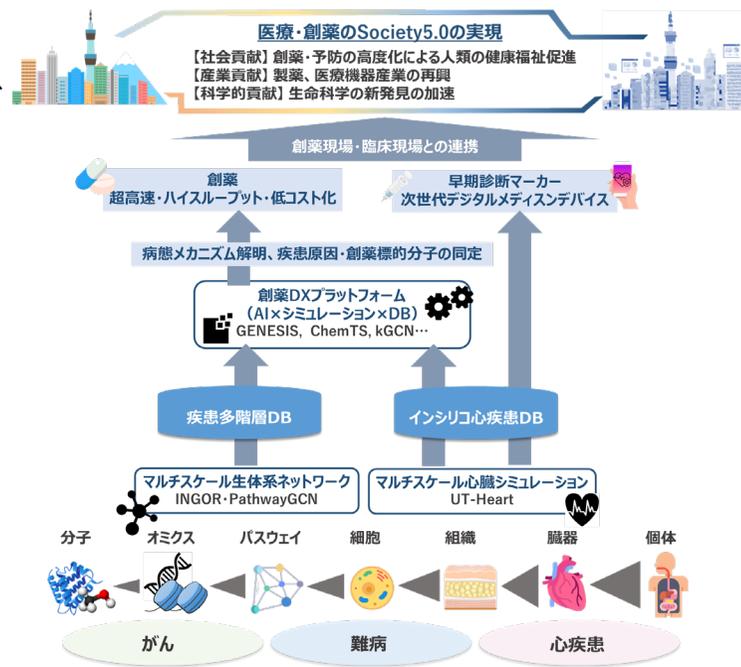
京都大学を代表機関とし、理研・東大・横浜市大・阪大・東工大・筑波大・弘前大・UT-Heart研等が協力機関となって、以下の2つグループに分かれて、8つの研究テーマに取り組む。さらに、90以上の製薬などのライフ系企業、IT系企業、アカデミアが参画する産学連携コンソーシアムLINCや国内主要医療機関、AMED事業（DAIIA, BINDS, P-PROMOTE）と連携し、社会実装を目指す。

社会実装グループ：

- ①疾患多階層データベースの構築と応用（京大）：ゲノム変異、分子構造、ダイナミクス、マルチオミクス、パスウェイ、細胞レベルでの疾患多階層データベースの構築と、疾患原因・創薬標的分子の探索と病態メカニズム解明
- ②インシリコ心疾患データベースの公開と応用（UT-Heart研、京大）：心臓シミュレーションによる心疾患データベースの構築と、実臨床データに基づくAIとの融合による拡張性心不全発症を早期に検出するバイオマーカーの探索
- ③創薬DXプラットフォームを用いた実践的創薬（京大）：難病のドラッグリポジショニング、がんの個別化医療・創薬の実践、アカデミア創薬テーマへの創薬応用
- ④インシリコ心毒性評価システムの評価と高精度化（東大、理研）：心筋細胞イオンチャネルへの抗がん剤のドッキングシミュレーションとUT-Heartの融合による不整脈発生リスク評価

次世代アプリケーション開発グループ：

- ⑤究極のマルチスケール心臓シミュレーション（UT-Heart研、京大）：収縮タンパクのMDと心臓の有限要素拍動解析を連成させたシミュレータの高速化と心疾患発症の解明・治療薬への応用
- ⑥MD×AIに基づく次世代創薬計算技術開発（横浜市大、京大）：MD（分子動力学計算）に基づく次世代バーチャルスクリーニング技術と、次世代化合物生成AI-MD融合手法の開発
- ⑦ニューモダリティ創薬のための創薬計算手法開発（理研、阪大、東工大、筑波大）：抗体・タンパク質医薬品・ペプチド医薬品・PROTACなどの新規モダリティ創薬に資する次世代計算手法の開発
- ⑧大規模生体系ネットワーク処理技術開発（京大、弘前大）：分子・細胞・臓器・個人・疾患の多階層マルチスケールの超巨大ネットワークを構築・予測する次世代AI技術の開発



想定される具体的成果

これまでのアプリ開発実績を「富岳」に適用し、医療・創薬の実用的な成果創出する。具体的には、1千種の疾患分子ネットワークの推定と1万以上の疾患変異を計算し、疾患多階層DBを構築・公開する。難病とがんを中心に創薬デザインを行い、前臨床導出を目指す。心臓シミュレーションによるバーチャル心疾患DBを構築し、公開する。さらに、富岳NEXTを見据えた次世代の医療・創薬計算技術を開発する。