

## マイクロコスモスに挑む生命シミュレータの創成

### ① ビジョンの概要

ビッグサイエンスへと変革を遂げつつある生命科学の大きな目標は、分子ネットワークのダイナミクスから細胞の動態を予測し、さらに生命体の高次機能に至るまで一貫通貫に理解することである。生命のドグマを階層縦断的に拡張することで生命の営みを予測するシミュレータを創成し、これによりマイクロコスモスに挑む時代が到来する。

### ② ビジョンの内容

生命科学は現在、スモールサイエンスからビッグサイエンスへの大変革の真っ只中にある。この変革は、前世紀末期に勃興したゲノミクスに端を発する生命情報の網羅的収集を基軸としており、その成果は、タンパク質3次元構造の高精度予測を実現するとともに、細胞内の分子ネットワークの全体像を俯瞰し、天文学的な複雑性を帯びた糖鎖が担う生命情報の解読を促しつつある。すなわち、生命情報のデジタル性に基づく古典的なセントラルドグマは、大規模データの集積と人工知能の支援により著しく拡張されつつある。

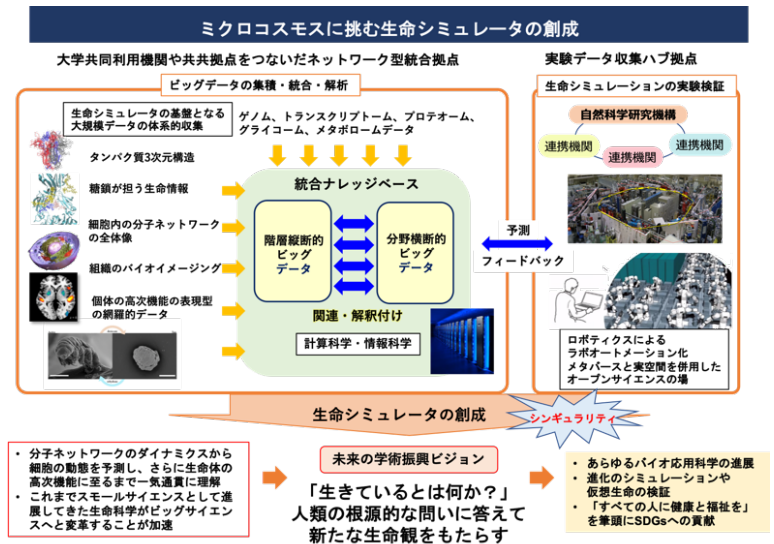


図1 学術の中長期研究戦略

こうした潮流の中で、分子ネットワークのダイナミクスから細胞の動態を予測し、さらに生命体の高次機能に至るまで一貫通貫に理解することが次世代の生命科学の課題である。すなわち、生命のドグマを階層縦断的に拡張することで生命の営みを予測する生命シミュレータの創成が生命科学の大きな目標となるであろう。生命シミュレータを創成することは、大規模な仮説の生成と検証のサイクルを実現し、生命に関する科学的発見を自律的に行うシステムの創成というグランドチャレンジも内包している。膨大な仮説の検証においては、生命の設計図の合成や書き換えとロボティクスによる実験自動化が重要な役割を演ずる。

このビジョンの実現は、「生きているとは何か。」という人類の根源的な問いに答えて新たな生命観をもたらすとともに、医学・薬学・農学・工学をはじめ、あらゆるバイオ応用科学の進展を促す。さらに、生命シミュレータを用いたマイクロコスモスの探査によってもたらされる生命のパラダイムシフトは、人文・社会科学との融合を通じることで豊かな未来社会の創造に資するであろう。

### ③ 学術研究構想の名称

マイクロコスモスに挑む生命シミュレータの創成

### ④ 学術研究構想の概要

分子レベルから個体レベルにいたる各階層をつなぐ情報を体系的に収集するための拠点を構築し、生命シミュレータのプロトタイプを完成する。そのために、我が国で稼働している大型施設（放射光、中性子線、スーパーコンピューター等）やクライオ電子顕微鏡、NMR分光器、質量分析装置などの設備ネットワークを統合するとともに、大規模データの集積・統合・解析の拠点を整備し、全てのデータを統合的に搭載したナレッジベースを構築する。これをもとに計算科学と情報科学を結集した生命シミュレータのプロトタイプの前創成に取り組む。大規模データの取得にはロボティクスによるラボオートメーション化が不可欠である。これは、実験操作の単なる省力化・迅速化・遠隔化にとどまらず、これまで暗黙知にとどまっていた熟練した実験者の技量・ノウハウを学習し、それをプログラムとして共有したロボット群による次世代型の研究環境の構築を促すものである。集積された大規模データをナレッジベースとして格納するためのシステムと、データを運用・活用するためのメタバースと実空間を併用したオープンサイエンスの場を構築する。

### ⑤ 学術的な意義

これまでスモールサイエンスとして進展してきた生命科学研究はビッグサイエンスへと大変革を遂げつつあり、この変革は家内制手工業から近代工業への産業革命にしばしば喩えられる。本構想が指向するラボオ

ートメーションや仮想空間での共同研究が加速し、オープンなリソースやナレッジベースが構築されることで、研究者は研究のアイデアとプロジェクトの企画を出すことに専念し、実験のデザイン、実験データ取得、データの解析、統合されたデータの解釈と新規な概念の創出というプロセスの分業化が進む状況を迎えることになる。これは、研究プロジェクトの成果発信の手法やプロジェクトに関わる研究者のモチベーションや評価のあり方にも変革をもたらすに違いない。

人工知能の支援により読み解かれる大規模データは、生命情報のデジタル性に基づく古典的なセントラルドグマを拡張している。ゲノムに直接コードされていないタンパク質の翻訳後修飾についても大規模な網羅的データに基づいた予測がいずれ可能となるであろう。大規模データを基盤として創成されるナレッジベースは、分子ネットワークのダイナミクスから細胞およびその集団の動態を予測することを可能とする生命シミュレータの基盤となる。これに加えて、組織・器官・個体の階層のデータを統合することにより、細胞系譜から高次機能発現に至るまで一貫して理解することができるようになる。すなわち、生命のドグマを階層縦断的に拡張することで生命の営みを予測するシミュレータを創成すれば、その応用範囲は医療や創薬、未来型農業や生態系保護などに至る。

## ⑥ 国内外の研究動向と当該構想の位置付け

ゲノミクスに端を発するオミクスアプローチはこれまで欧米に先導されており、タンパク質の立体構造予測システムの開発やミニマム・セルの創成やヒトゲノムの合成・書き換えと言った合成生物学のプロジェクトを主導するに至っている。また、欧米や中国は卓越した大規模施設を擁しており、ハード面では圧倒的に水をあけられている。海外ではビッグ・テックが情報技術開発を推進しているが、この面でも日本は圧倒的に立ち遅れている。こうした状況を打破するためには、セクターの壁を越えたオールジャパン体制での共創が不可欠である。

## ⑦ 社会的価値

ライフサイエンスの統合的ナレッジベースを活用した社会共創によって人類にもたらされる恩恵は枚挙にいとまがない。その成果は、未来型農業の推進により食料問題を解決する（SDGs 2）とともに、疾患や薬効の予測、テーラーメイド医療、バイオ医薬・ワクチン開発、微生物による環境浄化など健康・福祉に革新をもたらす（SDGs 3）。さらに、生態系の保護（SDGs 6・14・15）や環境負荷の軽減によるエネルギー問題解決（SDGs 7）などにも貢献する。また、進化のシミュレーションや仮想生命の検証などを通じて、人類に新たな生命観をもたらし、社会科学・心理学・哲学・宗教・芸術などにも広範な波及効果を与える。こうしたパラダイムシフトは、物心ともに豊かな未来社会を創造するであろう。

## ⑧ 実施計画等について

本研究構想は、分子から個体に渡る体系的な情報収集を行い、生命シミュレータのプロトタイプを完成する。当初の5年は主に、1)国内外の連携機関をつないだネットワーク型拠点の形成、2)実験データ収集のハブとなる拠点の整備、3)統合的ナレッジベースの構築、の3つを柱として実施し、大規模データの集積を行う。それと並走し、4)ビッグデータの統合と解析、5)シミュレーションの実験検証の基盤を整え、10年の間に全ての情報を統合して生命シミュレータのプロトタイプを構築する。

自然科学研究機構、特にその直轄センターである生命創成探究センター（ExCELLS）が、連携機関との緊密な連携・協力を通して本プロジェクトを推進する。自然科学研究機構は、研究開発に必要な設備の充実を図り、放射光、磁気共鳴、バイオイメージングなど個別の階層で高度化しつつある大型設備のネットワーク化を推進するとともに、オープンミックスラボを整備し、コミュニティを横断する異分野融合研究を加速する。既に ExCELLS は、メタボロミクスなどを基軸に統合システムバイオロジーを推進する慶應義塾大学先端生命科学研究所、グライコミクス研究を推進する糖鎖生命科学連携ネットワーク型拠点の中核である東海国立大学機構、生命の起源を探究する海洋研究開発機構、先端医療と創薬の共創拠点を要する名古屋市立大学など国内外の研究機関連携している。さらに、本構想の実現に向けて大阪大学蛋白質研究所、鳥取大学の工学研究センター、産業技術総合研究所等との連携を計画している。本研究学術構想の10年間の経費は1,100億円であり、その内、設備費および人件費を含む研究費を870億円、運営費を230億円と見積もっている。

## ⑨ 連絡先

加藤 晃一（自然科学研究機構・生命創成探究センター）