

第4回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー ～HPCI計算生命科学推進プログラム～

主催：大阪大学大学院 基礎工学研究科
(HPCI戦略プログラム分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム)

共催：NPO法人バイオグリッドセンター関西、(独)理化学研究所、(財)都市活力研究所、大阪大学臨床医学工学融合研究教育センター

日時：2013年1月25日(金)13:00～17:00

場所：フクラシア東京ステーション

プログラム：

- (1) システムズバイオロジーのための京コンピュータへの期待
NPO法人システム・バイオロジー研究機構 沖縄科学技術大学院大学 教授 北野 宏明
- (2) 創薬化学研究におけるスパコンへの期待
アステラス製薬(株)研究本部 化学研究所 リード化学研究室 主管研究員 片山 直子
- (3) 大規模スーパーコンピュータを活用した医薬候補低分子化合物の設計
富士通(株) バイオIT事業開発室 シニアディレクター 松本 俊二
- (4) スパコン「京」の創薬応用への期待：
世界最大規模の化合物空間からのインシリコ創薬の実現へ
京都大学大学院薬学研究科 教授 奥野 恭史
- (5) スパコン「京」と生命科学：
計算生命科学の導入としてのSCLS計算機システム
(独)理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 企画調整グループ 研究企画担当 木戸 善之

BioJapan2012に出展

日時：2012年10月10日(水)～12日(金)

場所：パシフィコ横浜

今回は、主催者に「IT創薬支援ゾーン」を設けていただき、さらに(株)京都コンステラ・テクノロジーズ、コンプレックス(株)の協賛もいただき3機関で出展いたしました。



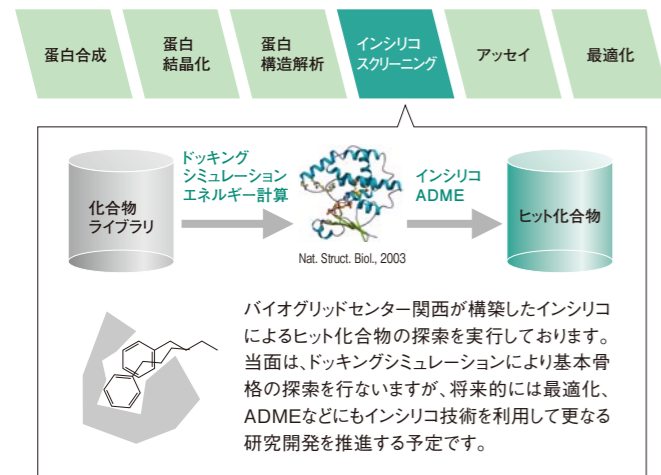
バイオインフォマティクス技術者認定試験に協力

日時：2012年11月25日(日)13:30～15:30

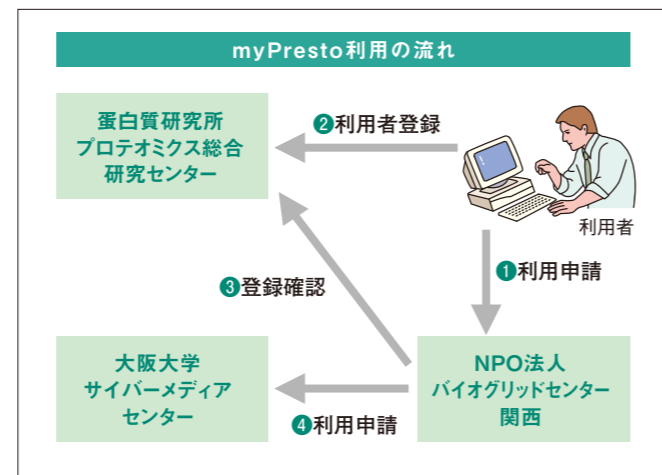
場所：(財)都市活力研究所 セミナールーム

情報基盤整備事業

NPO法人バイオグリッドセンター関西は、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータのライフサイエンス分野における民間活用の可能性を探るべく、NPOの会員向けにドッキングシ



ミュレーション(myPresto)をえるように環境を構築したものです。また、今後の実践的な利用拡大に向けて、「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」と連携して取り組んでまいりました。



研究開発型企業の起業支援および育成

ビジネスサロン

弁理士、弁護士、公認会計士、税理士、ベンチャーキャピタルなどのメンバーからなるビジネスサロン(ビジネス化支援会議)を随時開催し、研究成果の産業界への還元方法やベンチャー創出のための

支援体制について検討しております。2012年度は、以下のテーマで開催し意見交換を行ないました。

日程	テーマ	講師
5月30日	第68回バイオグリッドビジネスサロン 「中国への保険食品の輸出版売するにつけ、その市場、申請方法、販売方法」	豊田 繁 (バイオグリッドビジネスサロンアドバイザー)

特定非営利活動法人 バイオグリッドセンター関西

〒530-0011 大阪市北区大深町3-1 グランフロント大阪ナレッジキャピタル タワーC 7階
TEL:06-6359-1322(代表) FAX:06-6359-1329 URL:http://www.biogrid.jp



NPO活動報告2013 [2012年度の活動]

NPO BioGrid Center Kansai

特定非営利活動法人 バイオグリッドセンター関西

バイオグリッドセンター関西概要

NPO法人バイオグリッドセンター関西は、情報技術とバイオ、医療の融合分野におけるコミュニティを醸成し、研究開発、教育普及、さらには起業支援及び育成を行うことにより、大学等での研究成果を産業界へ迅速に技術移転し、当該分野における産学の連携強化と発展に資することを目的としています。具体的には、次世代のコンピュータとネットワークの融合技術GRID(グリッド)を基盤

に、遺伝子情報解析、蛋白質の立体構造予測はもとより、「バイオグリッドプロジェクト構想※」に基づく研究プロジェクト由来の技術や研究成果を、産業界においても活用し、科学技術の振興と地域社会の活性化を実現していきます。

※医薬品スクリーニング計算や蛋白質の生体シミュレーション等のソフトウェア開発を目指すプロジェクト

研究開発事業の企画立案およびコーディネート

スパコン「京」の創薬プロジェクト

課題名: バイオグリッドHPCIプロジェクト「新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築」
英語名: KBDD (K supercomputer-based drug discovery project by Biogrid pharma consortium)

NPO法人バイオグリッドセンター関西は、「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」においてアンケートやヒアリングや行った結果「成功事例」を見てみたいとの意見に対応するため自らが「京」を利用する創薬プロジェクトをコーディネートいたしました。このプロジェクトでは、当法人の会員である京都大学大学院薬学研究科の奥野先生の技術を利用して蛋白質(キナーゼ、GPCR 約350種)と低分子化合物3,000万個の相互作用を計算し、さらに参画メンバーの製薬企業が興味のある蛋白については、分子動力学を用いたMP-CAFFEEで結合自由エネルギーを求めるといふものです。

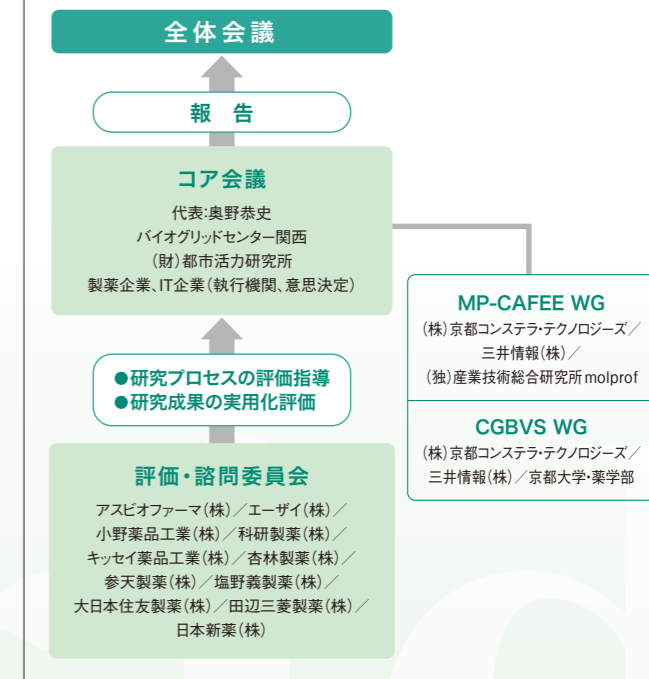
このプロジェクトの狙いは、「京」のアプリの産業利用の可能性の検証、製薬企業に対する「京」の習熟訓練、インシリコ創薬という新たな産業の創造です。現在11社の製薬企業と京大、産総研、IT企業として(株)京都コンステラ・テクノロジーズ、三井情報(株)が参画しています。



プロジェクトの概要



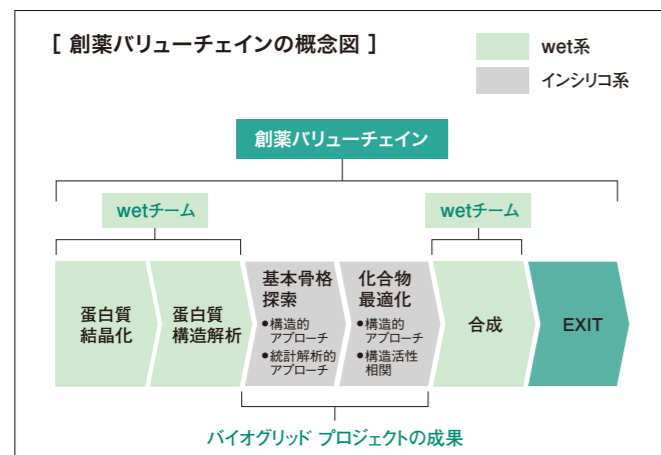
【研究開発推進体制】



❖ 創薬バリューチェーン

文部科学省ITプログラム「スーパーコンピュータネットワークの構築」(通称: バイオグリッド・プロジェクト、2002年～2006年)の研究成果の実用化の一環として、wet系(実験系)のプレーヤーも新たにチームに参画いただき、コンピュータシミュレーションなどの計算結果に基づき医薬品候補化合物を実際に合成し、創出する「創薬バリューチェーン」を実践しております。

このバリューチェーンの全体を利用した実践的な創薬プロジェクト



やチェーンの一部を利用した受託研究のため、新規プロジェクトのコーディネートなどを行っております。具体的には、結晶化から構造解析、あるいは蛋白質の構造情報に基づく大規模計算による化合物探索、計算化学による化合物の最適化などを行える体制を構築しております。

◎創薬バリューチェーンプロジェクト採択実績

- 2005年度 ◆ 知的クラスター創成事業〔2005年度～2006年度・文部科学省〕
 - 2006年度 ◆ 平成18年度保健医療分野における基礎研究推進事業研究プロジェクト〔2006年度～2010年度(独)医薬基盤研究所(厚生労働省)〕
 - 2007年度 ◆ 地域新生コンソーシアム研究開発事業〔2007年度・経済産業省〕
◆ 知的クラスター創成事業2期〔2007年度～2011年度・文部科学省〕
- 2012年度は、創薬バリューチェーンでこれまで実施したプロジェクトを科研費などで継続しております。

◎主な参画機関(協力機関含む)

大阪大学大学院工学研究科/大阪大学蛋白質研究所/京都大学大学院薬学研究所/大阪府立大学大学院理学系研究科/金沢大学がん研究所/(独)医薬基盤研究所/(独)産業技術総合研究所バイオメディカル情報研究センター/クリングルファーマ(株)/セルフリーサイエンス/(株)創晶/(財)都市活力研究所/日本電気(株)/(株)日立東日本ソリューションズ/(株)富士通九州システムズ/マルホ(株)/三井化学(株)/三井情報(株)

開発された技術の教育普及事業

❖ バイオグリッド研究会の開催

- 日時: 2012年5月26日(土) 14:00～17:00 [参加無料]
場所: (財)都市活力研究所 セミナールーム
大阪市北区梅田1-12-39 新阪急ビル9F (http://www.urban-ii.or.jp/about/)
主催: NPO法人バイオグリッドセンター関西
プログラム:
研究会 14:00～17:00
14:00～14:05 ご挨拶
NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事長 下條 真司
- (1) 14:05～14:30
「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」の経過報告とインシリコ創薬支援事業について
NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事 志水 隆一
- (2) 14:30～15:00
「GPCRに対するペプチド性リガンドの非ペプチド化の戦略: 新規 Scaffold hoppingの手法による活性化合物の探索と合成」
(独)産業技術総合研究所バイオメディカル情報研究センター
タンパク質構造情報解析チーム 主任研究員 福西 快文
- (3) 15:00～15:20
LigandBox: in silicoスクリーニングのための低分子化合物WEBデータベース
大阪大学蛋白質研究所 招へい研究員 川端 猛

- (4) 15:30～16:00
「生命科学分野でのスパコン「京」の利用 ～スパコン「京」へのご勧誘～」
(独)理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム
副プログラムディレクター 江口 至洋
 - (5) 16:00～16:30
KEGG MEDICUS と参加型医療
NPO法人バイオインフォマティクス・ジャパン
理事長(京都大学 化学研究所 特任教授) 金久 貴
 - (6) 16:30～17:00
ドラッグデザインのためのインシリコ手法の活用
キッセイ薬品工業(株) 創薬研究部 主任研究員 小沢 知永
- 交流会 17:00～18:30 [参加無料]



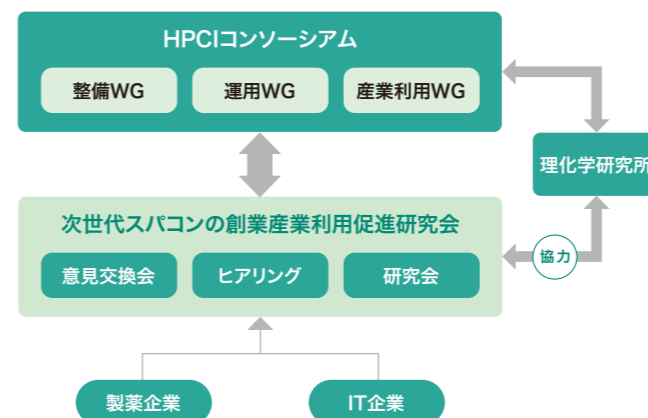
❖ 生命医薬情報学連合大会2012 スポンサーセッションに参加

- 日時: 2012年10月17日(水) 10:00～11:30
場所: タワーホール船堀 4階 研修室 東京都江戸川区船堀4-1-1
主催: 情報計算化学生物学会(CBI学会)、日本バイオインフォマティクス学会(JSBi)、オミックス医療研究会



❖ HPCIコンソーシアム

文部科学省が発足した、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)をはじめ、我が国の計算科学技術の振興に携わる幅広いコミュニティの活動を支え、その意見を集約するコンソーシアムである一般社団法人HPCIコンソーシアムに参加し今後のHPCIのあり方などについて提言などを行いました。



❖ インシリコ創薬支援事業(講習会・相談会の開催)

- myPresto
日時: 2012年6月7日(木) 14:00～17:00
場所: (財)都市活力研究所 セミナールーム
講師: (株)日立東日本ソリューションズ 三上 義明
- Platypus-QM/MM
日時: 2012年7月6日(金) 15:00～17:00
場所: (財)都市活力研究所 セミナールーム
講師: 大阪大学蛋白質研究所 中田 一人
- ゲノムインフォマティクス ～次世代シーケンサデータ解析の実践～
日時: 2012年8月3日(金) 14:00～17:00
場所: (財)都市活力研究所 セミナールーム
講師: 三菱スペース・ソフトウェア(株) 谷嶋 成樹
- CONFLEX&Gaussian
日時: 2012年9月28日(金) 13:00～16:00
場所: (財)都市活力研究所 セミナールーム
講師: コンプレックス(株) 中山 尚史
- MIZUHO/BioStation活用セミナー
～In silico創薬へのFMO法の活用: MIZUHO/BioStationの事例と実践～
日時: 2012年11月2日(金) 13:00～16:00
場所: (独)都市活力研究所 セミナールーム
講師: みずほ情報総研(株)

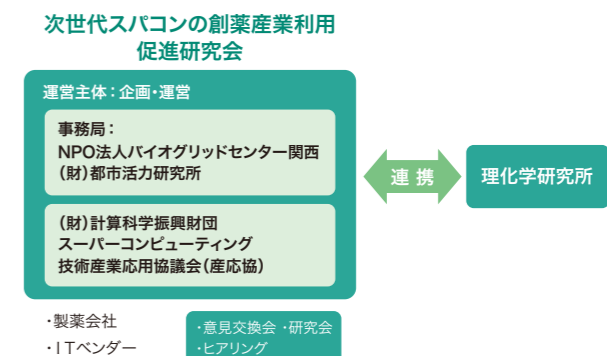
❖ 第3回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー ～HPCI計算生命科学推進プログラム～

- 主催: 大阪大学大学院 基礎工学研究科 (HPCI戦略プログラム分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム)
- 共催: NPO法人バイオグリッドセンター関西、(独)理化学研究所、(財)都市活力研究所、大阪大学臨床医工学融合研究教育センター
- 日時: 2012年12月19日(水) 13:00～17:00
場所: 大阪梅田センタービル
プログラム:
(1) 核酸医薬品創製のためのスパコンへの期待
甲南大学先端生命工学研究所 所長 杉本 直己

❖ 次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会

2012年9月に共用を開始したスーパーコンピュータ「京」の創薬分野における産業利用を促進するために、(財)都市活力研究所、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)、(財)計算科学振興財団などと連携しながら利用者(製薬会社)のニーズや創薬系バイオベンチャー企業、IT会社や研究者の意見を集約した結果、①トライアル利用の制度化、②利用講習会の開催、③成功事例の創出のための具体的な活動を行いました。

- ①については、HPCI産業利用枠の創設
- ②については、インシリコ創薬支援事業として講習会や相談会を開催
- ③については、前述の「スパコン「京」の創薬プロジェクト」の実施



- 創薬支援アプリ(ISLiMソフトウェア)講習会
場所: 東京 (独)理化学研究所 東京連絡事務所
日時: ●2013年2月7日(木)
13:00～15:00 REIN-K(開発コード: Platypus-REIN)
15:00～17:00 CafeMol
●2013年3月8日(金)
13:00～15:00 MARBLE-K
15:00～17:00 mu2lib-K(開発コード: Platypus-MM/CG)
- 場所: 大阪 (財)都市活力研究所 セミナールーム
日時: ●2013年2月20日(水)
13:00～15:00 mu2lib-K(開発コード: Platypus-MM/CG)
15:00～17:00 MARBLE-K
●2013年3月12日(火)
13:00～15:00 REIN-K(開発コード: Platypus-REIN)
15:00～17:00 CafeMol

