

NPO活動報告2017

[2016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」

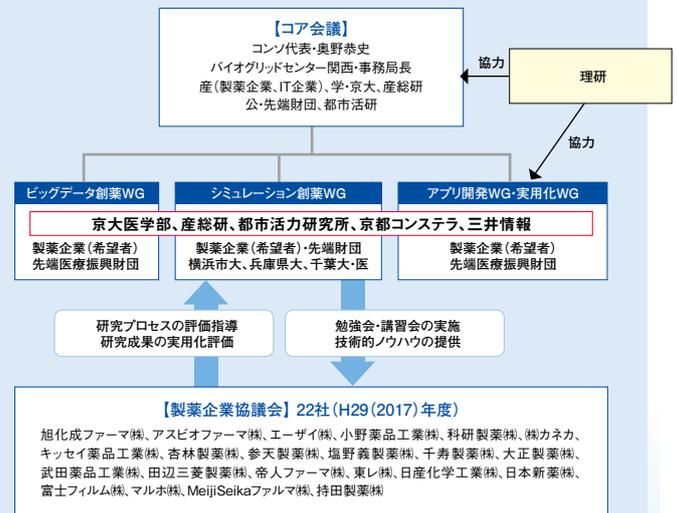
英語名：KBDD (K supercomputer-based drug discovery project by Biogrid pharma consortium)

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医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)631種と低分子化合物3000万個の約189.3億ペアの相互作用を5時間45分で計算し計算結果を参画メンバーに配布しました(2013年度)。一方、結合自由エネルギー(ΔG)を正確に見積もれる分子動力学を用いたアプリケーションMP-CAFEEの一般の蛋白質への応用のためのワークフローの構築と計算精度の検証を2013-2014年度に行いました。この結果、計算の初期ポーズが正しければ ΔG は正確に見積もれることがわかりました。これを受け2016年度は、初期結合ポーズの推定方法としてMMPBSA法やマルチカノニカル法の開発を行いました。また、MP-CAFEEを簡単に操作できるようにするためのGUIを改良し使いやすいものとなりました。

2017年度もスパコン「京」の産業利用枠にも採択され引き続きプロジェクトを継続します。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、2017年度も22社の製薬企業と京大、産総研、兵庫県大、横浜市大、千葉大、都市活研、先端財団、IT企業として京都コンステラ・テクノロジーズ、三井情報が参画します。2017年度はマルコフステートモデル(MSM)によるKon,Koffの予測をテーマとして活動を行います。



■ 推進体制(2017年度)



翻訳後修飾研究のフロンティアとそれを支える基盤技術
—創薬R&Dへの期待—

日 時：2016年4月22日(金) 13:00～17:55
場 所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル
北館タワーC 9階 Vislab OSAKA
(大阪市北区大深町3-1)
主 催：CBI学会関西部会
共 催：バイオグリッドセンター関西
都市活力研究所



●主な内容：
リン酸化、糖鎖付加、アセチル化、ユビキチン化(SUMO化)など多岐にわたる
蛋白質の翻訳後修飾について議論しました。
自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター 加藤晃一、
京都大学 大学院工学研究科 森本大智ほか

バイオグリッド研究会2016

～実用化に向けて動き出したスパコン創薬新時代～

日 時：2016年5月28日(土) 14:00～18:30
場 所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル 北館タワーC 8階 C02 (大阪市北区大深町3-1)
主 催：バイオグリッドセンター関西
共 催：都市活力研究所
後 援：公益財団法人計算科学振興財団、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
NPO法人近畿バイオインダストリー振興会議

●主な内容：
KBDDの概要と今後の展開
京都大学大学院医学研究科 教授 奥野 恭史
(NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事)



KBDDに対する製薬企業の期待と成果
塩野義製薬(株) フロンティア医薬研究所
計算化学グループ長 服部 一成

Shoubu(苜蓿) Green500
トップ計算機の紹介

(国)理化学研究所 情報基盤センター ユニットリーダー 黒川 原佳

健康“生き活き”羅針盤リサーチコンプレックス(神戸リサコン)の紹介

(国)理化学研究所 健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム
リサーチコンプレックス戦略室 事業開発戦略ナビゲーター 薬師寺 秀樹

FMOコンソの成果報告

日本大学松戸歯学部 化学教室 助教 福澤 薫(現 星薬科大学 准教授)

AI創薬の可能性と展望について

日 時：2016年9月1日(金) 13:30～17:55
場 所：グランフロント大阪 北館タワーB
10階
主 催：CBI学会関西部会
共 催：バイオグリッドセンター関西、
都市活力研究所



●主な内容：
理化学研究所 革新知能統合研究センターについて
理化学研究所 革新知能統合研究センター 上田修功
人工知能の現状と展望 — 医療・生命科学への適用
産業技術総合研究所 人工知能研究センター 辻井潤一

社会全体の知の分析に向けて

情報通信研究機構 ユニバーサルコミュニケーション研究所 データ駆動知能システム研究センター
鳥澤 健太郎

脳科学が拓く次世代ICT社会

情報通信研究機構 脳情報通信融合研究センター 柳田敏雄

fMRI脳機能イメージング:新しいバイオマーカーを求めて

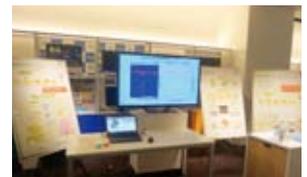
日 時：2016年11月25日(金) 13:00～17:55
場 所：グランフロント大阪
主 催：CBI学会関西部会
共 催：バイオグリッドセンター関西、都市活力研究所

AI創薬の可能性:自然言語処理技術の現状と課題

日 時：2017年2月3日(金) 13:30～17:55
場 所：グランフロント大阪 北館タワーC 9階 Vislab OSAKA
主 催：CBI学会関西部会
共 催：バイオグリッドセンター関西、都市活力研究所

うめきた「The Lab」における
「スパコンと創薬」のアウトリーチ活動

日 時：2016年10月7日(金)～2017年3月31日(金) 10:00～21:00
場 所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル 3F The Lab. VisLab OSAKAブース
(大阪市北区大深町3-1)
展示内容：①薬づくりの工程をわかりやすく解説(パネル)
②3D蛋白モデルの操作体験(PC)
③3D蛋白模型(実物体験)
④スパコン「京」を使ったプロジェクトの紹介および計算結果(映像)



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援、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。



バイオインフォマティクス技術者認定試験に協賛

日 時：2016年12月4日(日) 13:30～15:30
場 所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル 北館タワーC 8階(大阪市北区大深町3-1)

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をNPOの会員向けに利用できるように致しました。

