

NPO活動報告2018

[2017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」

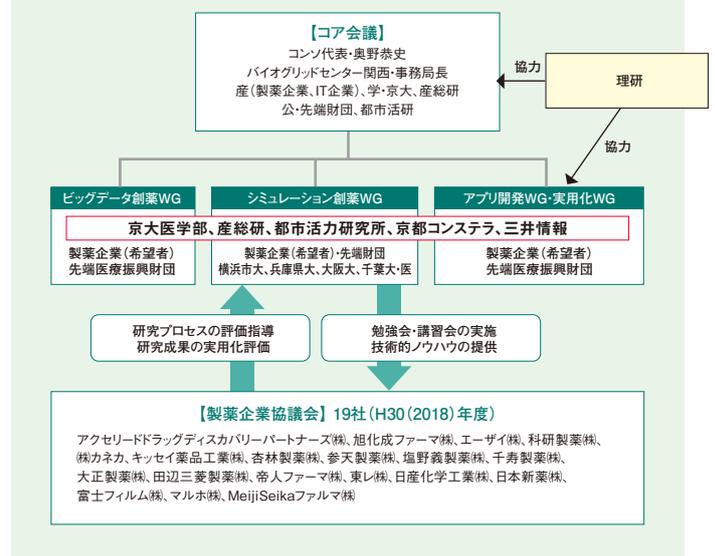
英語名:KBDD (K supercomputer-based drug discovery project by Biogrid pharma consortium)

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2013-2015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しており、比較的計算が簡単な蛋白についてKonを計算できることが確認できました。2018年度はマルコフステートモデル(MSM)によるKon、Koffを難易度の高い蛋白での予測を行います。なお、本プロジェクトは、スパコン「京」の産業利用枠に2018年度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、2018年度も19社の製薬企業と京大、産総研、兵庫県大、横浜市大、千葉大、摂南大、都市活研、神戸医療産業都市推進機構、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。



■ 推進体制(2018年度)



CBI学会講演会

「健康と疾病予防に向けたビッグデータ解析」

日 時：2017年5月12日(金) 13:00-19:40
 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 Vistlab OSAKA
 (大阪市北区大深町3-1)
 主 催：CBI学会関西支部
 共 催：NPO法人バイオグリッドセンター関西、
 公益財団法人都市活力研究所



●主な内容：

従来からの臨床情報や各種実験データとはやや異なった形で、ウェアラブルデバイス等からの大量のデータ取得が可能になり、これらのデータの利用は医学や創薬科学の境界を変えようとしている。本研究会では、生活習慣や身体活動から腸内細菌叢に至る幅広いデータに関して、それらの解析に携わっている第一線の研究者に講演頂き、健康と疾病予防に向けた議論を深めました。

バイオグリッド研究会2017

～AI、シミュレーション、システムバイオロジーと創薬～

日 時：2017年5月27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：公益財団法人都市活力研究所
 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：

「阪大サイバーの新しい協働研究所について」
 理事長 下條真司(大阪大学 サイバーメディアセンター長)
 「スパコン創薬コンソ KBDDの成果報告」
 河合健太郎(科研製薬株式会社 新薬創生センター)
 「AIコンソ(LINC)の将来展望」
 奥野 恭史(京都大学大学院医学研究科 教授)
 我が国のライフサイエンスインフラ
 「日本のライフサイエンスのコア・データベースの紹介」
 副理事長 中村 春木(大阪大学蛋白質研究所 教授)
 「多様な計算ニーズに対応する全国共同利用大規模並列計算システム」
 伊達 進(大阪大学サイバーメディアセンター 准教授)
 「スマート創薬による、新しいITとの連携のススメ」
 関崎 政和(東京工業大学 科学技術創成研究院 スマート創薬研究ユニット ユニットリーダー・准教授)
 「システムバイオロジーと創薬」
 岡田 眞里子(大阪大学蛋白質研究所 教授)



CBI学会講演会

薬物-標的親和性計算の新潮流～古典MDから量子MDへ～

日 時：2017年9月1日(金) 13:30-20:00
 場 所：グランフロント大阪 北館タワーC9階
 Vistlab OSAKA
 (大阪市北区大深町3-1)
 主 催：CBI学会関西支部
 共 催：NPO法人バイオグリッドセンター関西、
 公益財団法人都市活力研究所



●主な内容：

「はじめに：構造を基盤とした創薬の課題と計算化学への期待」
 木下 富富(大阪府立大学)
 「QM/MM-MDのベンチマークと酵素反応の各種シミュレーション」
 阿部 幸浩(HPCシステムズ株式会社)
 「FMO-QM/MM分子動力学計算と量子化学による創薬研究」
 石川 岳志(長崎大学)
 「密度汎関数束縛に基づいたフラグメント分子軌道法の開発とその応用」
 Dmitri Fedorov(産業技術総合研究所)
 「大規模量子MDとデータ科学による有機デバイス材料研究」
 星 健夫(鳥取大学)

第6回生命医薬情報学連合大会BioGridセッション

～ライフサイエンス分野におけるAI戦略～

日 時：2017年9月27日(金) 13:35-15:05
 場 所：北海道大学 情報科学研究科棟
 主 催：日本バイオインフォマティクス学会(JSBI)、
 日本オミックス医療学会、CBI学会



●主な内容：

「医療・創薬分野での研究アライアンスと人工知能研究への期待」
 江口 至洋(理化学研究所客員主管研究員、NPO法人システム薬学研究機構理事)
 「IT企業のライフ分野におけるAIへの取り組み」
 丸山 文宏(富士通研究所 人工知能研究所)
 ■■フリートークセッション■■
 「製薬企業の限界とAIへの期待」
 江口氏、丸山氏、奥村 利幸氏(塩野義製薬 デジタルインテリジェンス部)

FMODD・KBDD合同公開シンポジウム

—MDとQMの融合から創薬へ—

日 時：2017年10月4日(水) 14:30-18:00
 場 所：タワーホール船堀 小ホール
 主 催：NPO法人バイオグリッドセンター関西
 共 催：CBI学会FMO研究会



インシリコ創薬分野では、スーパーコンピュータ「京」を用いたコンソーシアム型の産業利用課題が現在2つ進行中である。KBDDは超精密な古典MDに基づいており、FMODDはQM手法であるフラグメント分子軌道法が基盤となっている。この二つの軸が融合することでインシリコ創薬の新しい可能性が拓けることを期待して、合同シンポジウムを開催した。

●主な内容：

「医療における薬の重要性とアリーステージにおける製薬企業同士の連携」
 江口 至洋(NPO法人システム薬学研究機構 理事・東京理科大学薬学部 客員教授)
 ■■第1セッション KBDD報告(15:00-16:00)■■
 座長:奥野 恭史(京都大学大学院医学研究科 教授)
 「KBDDの歩み」荒木 望嗣(京都大学大学院医学研究科)
 「製薬企業からの報告」安尾 和也 (塩野義製薬株式会社)
 ■■第2セッション FMODD報告■■
 座長:上村 みどり(帝人ファーマ株式会社)
 「FMO創薬コンソーシアムにおける活動」福澤 薫(星薬科大学薬学部)
 「PPI阻害剤へのFMO計算の適応事例について」小澤 基裕(キッセイ薬品工業株式会社)
 ■■パネルディスカッション■■
 「MDとQMの融合から創薬へ」
 司 会
 本間 光貴(理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター)
 パネリスト
 江口 至洋 (NPO法人システム薬学研究機構 理事東京理科大学薬学部 客員教授)
 田中 成典 (神戸大学大学院システム情報学研究所)、福澤 薫(星薬科大学薬学部)
 上村 みどり(帝人ファーマ株式会社)、奥野 恭史(京都大学大学院医学研究科)
 鷹羽 健一郎(旭化成ファーマ株式会社)、安尾 和也(塩野義製薬株式会社)

CBI学会講演会

臨床分野におけるAI活用の可能性と実際

日 時：2017年12月22日(金) 13:00-19:15
 場 所：グランフロント大阪
 主 催：CBI学会関西支部
 共 催：NPO法人バイオグリッドセンター関西、
 公益財団法人都市活力研究所



●主な内容：

「大阪大学におけるビッグデータへの取り組み」
 理事長 下條 真司(大阪大学 サイバーメディアセンター長)
 「弘前COIの将来展望—超多項目健康ビッグデータをどう活かすか—」
 村下 公一(弘前大学)
 「医療・ライフサイエンス分野でのディープラーニング活用」
 山田泰永(エヌビディア合同会社 メディカル・ライフサイエンスビジネス責任者)
 「産学連携コンソーシアム LINCで挑むAI創薬」
 奥野 恭史(京都大学大学院医学研究科 教授)

バイオインフォマティクス技術者認定試験に協賛

日 時：2017年12月3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が、2017年度の利用はありませんでした。2018年度は利用促進に努めたいと思います。

特定非営利活動法人 バイオグリッドセンター関西 (BioGrid Center Kansai)

〒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 7F
 TEL:06-6359-1322(代表) FAX:06-6359-1329 URL:http://www.biogrid.jp