

NPO活動報告2019

[2018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、2012年に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-CAFFEE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2013-2016年度に行いました。

2017年度からは、マルコフ・ステート・モデル(MSM:Markov State Models)法に基づいた大規模分散型分子動力学シミュレーション解析を行うことで、化合物の結合解離の速度定数(K_{on} 、 K_{off})の予測に取り組んでいます。2018年度は、これらの知見やノウハウを元に以下の3つを主なテーマの開発を行いました。

- ① 化合物結合過程に関わる情報を正確かつ効率的に取得するためのシミュレーション・MSM解析手法の開発
- ② 汎用性の向上(高難度の蛋白質(HSP90)での実行)
- ③ 精度向上のための効率的な初期構造探索手法の開発

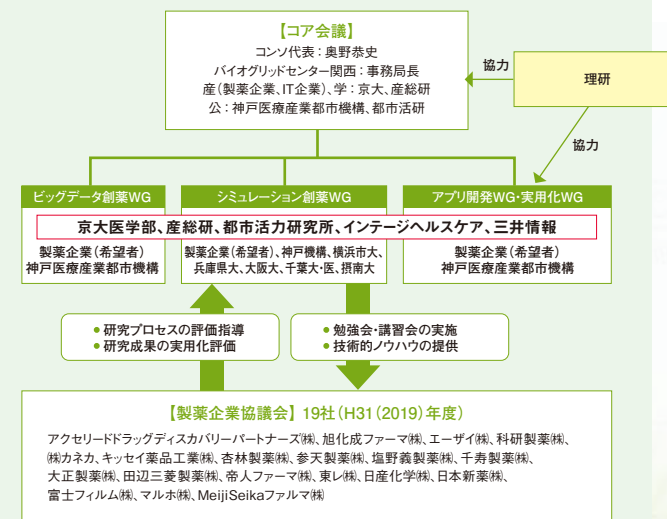
なお、本プロジェクトは、HPCIの産業利用枠(スパコン「京」、東工大TSUBAME3.0)に2019年度も採択され右図のような体制で実施します。



【表彰式】2018/11/2 【於】THE GRAND HALL(品川)

表彰式に参加した、シミュレーションWGリーダー荒木 望嗣氏(京都大学 医学研究科 左から2人目)

■ 推進体制(2019年度)



また、本課題は、平成29年度 HPCI利用研究課題において「優秀成果賞」を受賞いたしました。

分子ロボティクス:これまでの成果と創薬応用への可能性について

日 時: 2018年5月18日(金) 13:30-19:30
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(大阪市北区大深町3-1)

研究会: 9F Vislab OSAKA
交流会: 都市活研セミナールーム
主 催: CBI学会関西西部会
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: 基礎研究としては注目を集めている分子ロボティクスであるが、応用技術への展開はほとんど手付かずです。本講演では、創薬への応用可能性が高い核酸技術を中心に分子ロボティクス技術について紹介しました。

- 「分子ロボティクス:これまでの成果と将来構想」
小長谷 明彦(東京工業大学)
- 「RNA分子ロボティクスのiPS細胞への活用」
齊藤 博英(京都大学)
- 「非環状型人工核酸による分子演算の拡張と核酸医薬への展開」
浅沼 浩之(名古屋大学)
- 「インテリジェントDDSキャリア・3次元培養基材としてのインジェクタブルDNAヒドロゲル」
葛谷 明紀(関西大学)
- 「DNAオリガミを用いた反応場制御」
多田 隈 尚史(大阪大学)
- 総合討論 ■ 交流会

バイオグリッド研究会2018 ～産学共創におけるオープンサイエンスとデータ解析～

日 時: 2018年5月26日(土) 13:30-19:00
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(大阪市北区大深町3-1)

研究会: 9F Vislab OSAKA
交流会: 都市活研セミナールーム
主 催: バイオグリッドセンター関西
共 催: 都市活力研究所



» 主な内容: バイオグリッドの今後の方向性を探るため、産学連携とオープンサイエンスの新たな展開やAIなどの可能性や動向あるいは実用化事例を紹介いただき、データサイエンスの可能性について議論いたしました。

- 「産学連携とオープンサイエンスの新たな展開」
理事長 下條 真司(大阪大学 サイバーメディアセンター長)
- 「GPUコンピューティング技術に関わる産学共創の紹介」
伊野 文彦(大阪大学大学院情報科学研究科 教授)
- 「産学で活用頂けるデータベースサービスとデータ統合の取組について」
星 潤一(科学技術振興機構 バイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)企画運営室)
- 「産学連携におけるヘルスケア革新—クラウド・AIの視点から」
堂田 丈明(名古屋大学産学連携研究協力課 客員准教授)
- 「ライフコース健康情報の収集と個別化解析: 故障予知から発症予測へ」
渡部 祐己(シスメックス(株) 中央研究所 第一研究グループ 部長)
- AIコンソーシアム「LINC」の紹介
理事 志水 隆一(LINC事務局次長)
- エンディング・リマーク
副理事長 中村 春木(元・大阪大学蛋白質研究所 所長)
- 交流会 (公財)都市活力研究所 セミナールーム

Beyond the green

日 時: 2018年9月28日(金) 13:00-19:00
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(大阪市北区大深町3-1)

研究会: 7F 大阪イノベーションハブ
交流会: 都市活研セミナールーム
主 催: CBI学会関西西部会
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: 近年医薬品業界においては、大規模な投資からオープンイノベーションへの転換、医師中心から患者中心へ、治療薬提供はもちろんであるが患者のQOL実現も含めた取り組み、治療薬と診断薬、予防薬との組み合わせなどが行われています。欧米では既にGoogleなどがメガファーマと協業してライフサイエンス分野に進出しています。またpatients like meのような患者SNSサイトを利用して情報交換を行っています。本セミナーでは日本における法整備の現状と、今後患者中心の医療をどう実現していくかなどを講演いただきました。

- 始めに 理事 坂田 恒昭(CBI学会関西西部会副会長)
- 【基調講演】「21世紀を考えるキーワード」
西川 伸一(京都大学)
- 「次世代医療基盤法について」
田中 謙一(内閣官房 健康・医療戦略室)
- 「ライフサイエンス領域におけるAI技術とデータマネージメント」
堂田 丈明(名古屋大学)
- 「医薬品開発におけるAI、ビッグデータの活用」
青島 健(エーザイ株式会社)
- 「未病社会に必要なプレジジョン・メディシン」
佐藤 孝明(島津製作所)
- 「パーソナルゲノム情報」
高野 誠大(AWAKENS)
- 総合討論 ■ 交流会

ここまで来た、臓器チップ～創薬活用における現状と課題～

日 時: 2019年1月18日(金) 13:00-19:30
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(大阪市北区大深町3-1)

研究会: 9F Vislab OSAKA
交流会: 都市活研セミナールーム
主 催: CBI学会関西西部会
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: 近年、細胞を3次元的に配置し、組織及び臓器レベルの生理学的機能を再現しようとするOrgan on a chip(臓器チップ)と呼ばれる研究領域が世界的に急速な広がりを見せています。本セミナーでは、今後のチップ技術の創薬への応用や、他技術領域との連携の可能性や課題点について議論しました。

- 世話人挨拶
植松 直也(大塚製薬)、六嶋正知(塩野義製薬)、森浩禎(奈良先端大)
- 「臓器チップ開発の動向と目指すべき方向性」
藤田 聡史(産業技術総合研究所)
- 「マイクロ流体デバイスによる生体機能の再現」
鳥澤 勇介(京都大学白眉センター)
- 「臓器統合モデルと創薬への応用」
亀井 謙一郎(京都大学高等研究院物質-細胞統合システム拠点)
- 「機能的なオンチップ血管ネットワーク」
横川 隆司(京都大学大学院工学研究科)
- 「理研 立体器官培養エンジニアリングネットワークの取り組み」
森本 充(理化学研究所生命機能科学研究センター呼吸器形成研究チーム)
- 「血液脳関門(BBB)チップの可能性」
松崎 典弥(大阪大学大学院工学研究科)
- パネルディスカッション ■ 交流会

バイオインフォマティクス技術者認定試験に協賛

日 時: 2018年12月2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。

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