

● 第10回バイオメディカル研究会

日時: 2011年3月5日(土) 13:00~17:00
 場所: 大阪大学中ノ島センター10F 佐治敬三メモリアルホール
 主催: 日本バイオインフォマティクス学会 関西地域部会
 共催: NPO法人バイオグリッドセンター関西
 京都大学大学院薬学研究所 システム創薬科学講座

プログラム:

(1) 13:00~13:05 開会挨拶
 関西地域部会長(京都大学大学院薬学研究所・教授) 奥野 泰史氏

(2) 13:05~13:45

講演1: タンパク質の相互作用部位の構造比較から見る機能予測の問題点

大阪大学蛋白質研究所情報科学研究系・准教授 金城 玲氏

(3) 13:45~14:15

講演2: 分子間相互作用に関する知識マイニングとキナーゼ阻害剤探索への応用

京都大学大学院薬学研究所・助教 新島 聡氏

(4) 14:30~17:00

「パネルディスカッション～関西発医療イノベーションに向けて～」

講演: 個人情報保護制度はどうあるべきか — 米国 HIPAA プライバシールールを参考に臨床情報の共有及び利用の限界を考える —

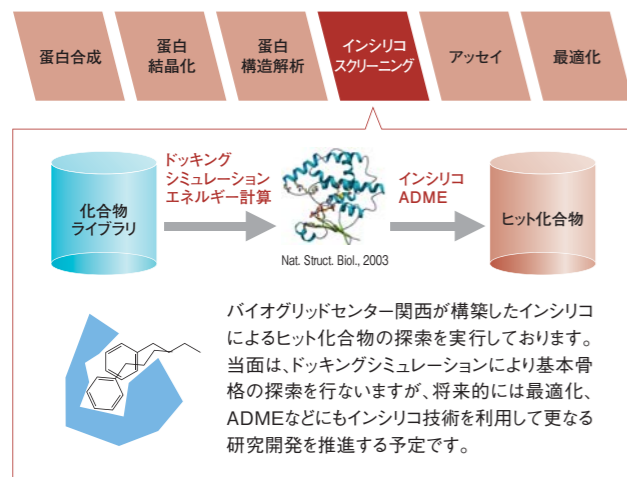
弁護士/ニューヨーク州弁護士 (北浜法律事務所・外国法共同事業 パートナー) 井垣 太介氏

ディスカッション

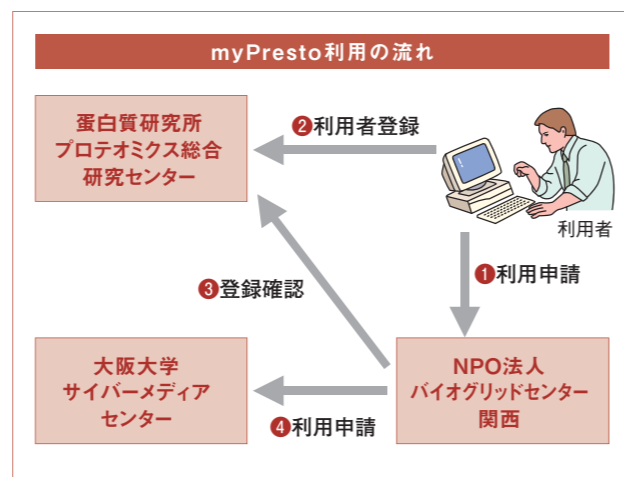
パネリスト: 参議院議員/医師 梅村 聡氏
 弁護士/ニューヨーク州弁護士 井垣 太介氏
 大阪府商工労働部・理事 北野 義幸氏
 神戸市企画調整局参与(医療産業都市担当) 三木 孝氏
 大阪大学サイバーメディアセンター 特任教授 坂田 恒昭氏
 司会: 京都大学大学院薬学研究所 教授 奥野 泰史氏
 総括: 参議院議員/医師 梅村 聡氏

○ 情報基盤整備事業

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)をでき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。



myPresto利用の流れ



○ 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。2010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	6月2日
テーマ	「なぜ今ブラジルか? その医薬品市場とそこへの参入アイデア」 — インド、ブラジル、日本の首相力・国力の比較 —
講師	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

〒530-0001 大阪市北区梅田1-12-39 新阪急ビル9階

TEL: 06-6344-2665 FAX: 06-6344-2668 URL: http://www.biogrid.jp



NPO 活動報告 2011 [2010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。

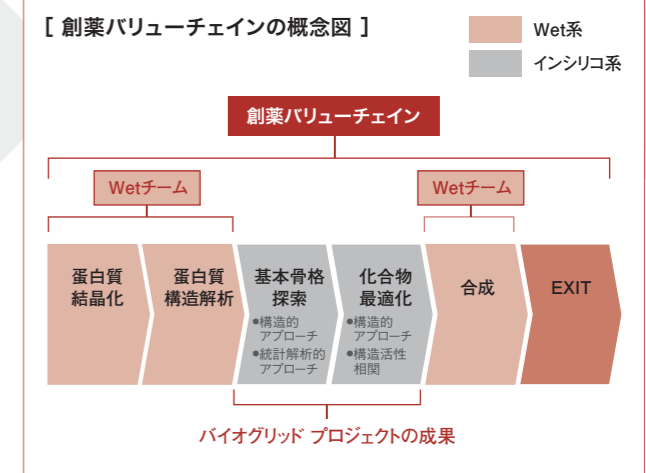
* 医薬品スクリーニング計算や蛋白質の生体シミュレーション等のソフトウェア開発を目指すプロジェクト

○ 研究開発事業の企画立案およびコーディネート

● 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なっております。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

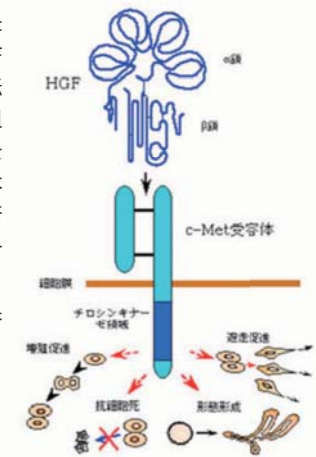
- 2005年度 ◆ 知的クラスター創成事業 [2005年度・2006年度・文部科学省]
- 2006年度 ◆ 平成18年度保健医療分野における基礎研究推進事業研究プロジェクト [2006年度・2010年度・(独)医薬基盤研究所(厚生労働省)]
- 2007年度 ◆ 地域新生コンソーシアム研究開発事業 [2007年度・経済産業省]
- ◆ 知的クラスター創成事業2期 [2007年度・2011年度予定・文部科学省]

◎ 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/(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/ファルマ・アクセス(株)/(株)富士通九州システムズ/マルホ(株)/三井情報(株)

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の成果

2010年度が最終年度となった本プロジェクトでは、MetにHGFが結合することで癌細胞の転移・浸潤が起こるメカニズム阻害するためMet-HGFの結合を阻害する低分子化合物の基本骨格を同定しました。今後は、新規プロジェクトを立上げ低分子化合物の薬効の向上のほか、水溶性を高めるなど物性の改良などを行う予定です。



○ 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：2010年5月29日(土) 13:30～17:00

場所：阪急ターミナルスクエア

主催：NPO法人バイオグリッドセンター関西

プログラム：

(1) 13:30～13:40 挨拶
バイオグリッドセンター関西 理事長(独立行政法人情報通信研究機構 上席研究員 大手町ネットワーク研究統括センター長) 下條 真司氏

(2) 13:40～14:20

計算・定量生命科学：生命のシステム科学

大阪大学大学院 生命機能研究科 教授 柳田 敏雄氏

(3) 14:20～14:30

創薬バリューチェーンの最新動向

バイオグリッドセンター関西 理事
(大阪大学サイバーメディアセンター 特任教授) 坂田 恒昭氏

(4) 14:30～14:40

次世代スパコン研究会のアクティビティ

バイオグリッドセンター関西 理事
(財団法人都市活力研究所 主席研究員) 志水 隆一氏

(5) 14:40～15:15

Structure-Based Drug Designからみた
インシリコ計算化学への期待

大阪府立大学 大学院理学系研究科 生物科学専攻 准教授 木下 誉富氏

(6) 15:30～15:50

創薬におけるスパコン利用支援サービスについて

三井情報株式会社 総合研究所 バイオサイエンスチーム
シニアプロジェクトマネージャ(バイオグリッドセンター関西 理事) 奥村 利幸氏

(7) 15:50～16:10

創薬支援事業におけるスパコン利用と大規模計算への展望

株式会社京都コンステラ・テクノロジーズ 受託解析事業部
主席研究員 金井 千里氏

(8) 16:10～16:30

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)
とこの構築を主導するコンソーシアムのグランドデザイン

バイオグリッドセンター関西 理事
(元NEC 基礎・環境研究所 主席研究員) 高田 俊和氏

(9) 16:30～16:45

大規模ネットワーク解析と創薬への応用

バイオグリッドセンター関西 副理事長
(大阪大学大学院情報科学研究科 教授) 松田 秀雄氏

(10) 16:45～17:00

次世代スパコンと創薬加速

バイオグリッドセンター関西 副理事長(大阪大学蛋白質研究所 教授)
中村 春木氏



● HPCIコンソーシアムに参画

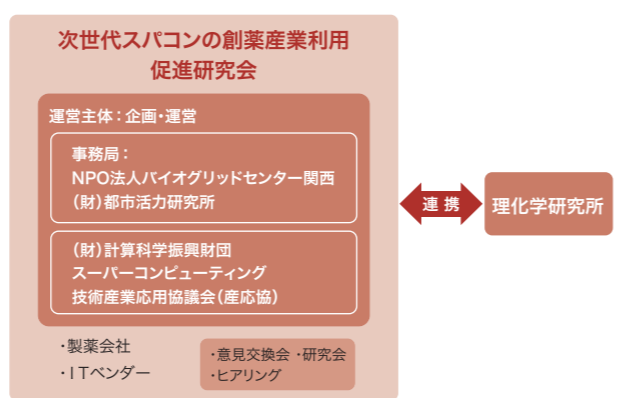
文部科学省が発足した、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築を主導する準備段階におけるコンソーシアム構成機関にユーザコミュニティ機関として2010年7月28日に採択され、HPCIの在り方やコンソーシアムの在り方について検討を行っています。

また、HPCIコンソにおいては産業利用促進検討WGの委員として参加し、主に創薬分野における産業利用促進に対する提案

を行っています。2010年度は、7回の産業利用促進検討WGやシステム基本仕様検討WGとの意見交換会などに参加し2011年度には報告書を取りまとめる予定で調査検討を行っています。産業界からの要望としては、セキュリティの確保、高速大容量ネットワークへのアクセス、利便性の高い活用拠点の整備、様々な支援機能の整備(アプリ利用、環境構築、並列化プログラミング)、トライアル利用制度の導入などを挙げています。

● 次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会

現在、神戸で2012年度完成予定の次世代スーパーコンピュータ(神戸ベタコン)の開発が行われており、そのアプリケーションとして「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア」や「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の開発が進められています。われわれは、これまでの「インシリコ創薬」の実績から、創薬分野における神戸ベタコンの産業利用を促進するために、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するとともに、開発の現状を把握し、産業利用促進のための方策を検討・提言する研究会を(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2009年度に立ち上げました。2010年度は、理化学研究所の次世代スパコンのアプリケーション開発者らと製薬企業の計算化学の担当者を中心に意見交換会を行っています。ここでの意見



は、直接、理化学研究所にフィードバックすると共に、HPCIコンソの産業利用促進検討WGにも意見集約してフィードバックをするようにしています。

日時：2010年12月22日(水) 13:00～15:00

場所：日本製薬工業協会 会議室

日時：2010年12月24日(金) 13:00～14:30

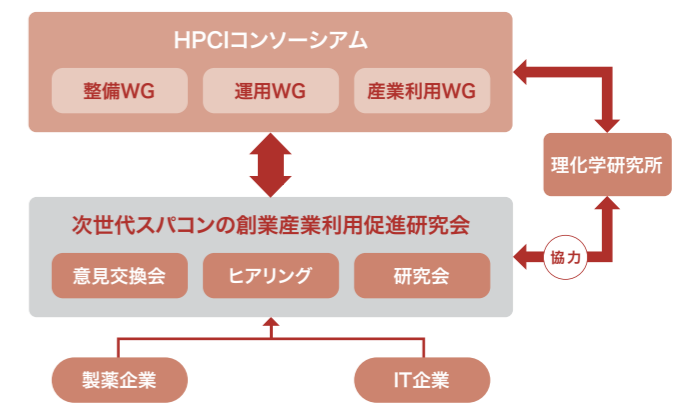
場所：大阪医薬品協会 会議室

プログラム：次世代スパコンで開発中のアプリケーションの概要
講師：理化学研究所 次世代生命体統合シミュレーション
研究推進グループ グループディレクター 姫野 龍太郎氏

日時：2011年3月8日(火) 10:00～12:00

場所：日本製薬工業協会 会議室

プログラム：ネットワーク推定のアプリケーションについて
講師：東京大学 医科学研究所
ヒトゲノム解析センター 教授 宮野 悟氏



● スーパーコンピューティング・セミナーin関西

日時：2010年10月1日(金) 13:00～17:05

場所：甲南大学ポートアイランドキャンパス

主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
財団法人計算科学振興財団
NPO法人バイオグリッドセンター関西
財団法人都市活力研究所

共催：甲南大学

プログラム：

(1) 13:00～13:15 開会挨拶

(2) 13:15～13:25 テーマ主旨説明
産応協 運営小委員会副委員長/味の素様H班GEP 安東 敏彦氏

(3) 13:25～14:05

基調講演：蛋白の変異における構造予測

甲南大学 先端生命工学研究所 所長 杉本 直己氏

(4) 14:05～14:45

生命科学のグランドチャレンジで開発しているアプリケーションの紹介

理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム
副プログラムディレクター 姫野 龍太郎氏

(5) 14:45～15:25

実証的臓器代謝シミュレーションの開発と医学応用への展望

慶應義塾大学医学部 部長、医学部医化学教室 教授 末松 誠氏



(6) 15:40～16:00

インシリコ創薬の実証実験プロジェクト「創薬バリューチェーン」
について

NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事/(財)都市活力研究所
主席研究員 志水隆一氏

(7) 16:00～16:40

製薬会社におけるスパコンの活用と期待するところ

塩野義製薬(株) 創薬・探索研究所 先端創薬推進部門 部門長
辻下英樹氏

(8) 16:40～17:00 総会討論

(9) 17:00～17:05 閉会のご挨拶

バイオグリッドセンター関西 理事長 下條 真司氏

(10) 17:20～19:00 情報交流会

● 蛋白質立体構造解析NEDO特別講座への協力

NPO法人バイオグリッドセンター関西は本講座開催に際して、スパコンの利用環境の提供を行いました。

日時：2010年10月8日(金)・9日(土)、15日(金)・16日(土)、22日(金)・
23日(土)、29日(金)・30日(土)
金曜 18:00-21:00、土曜 9:00-12:00

場所：大阪大学バイオ関連多目的研究施設3階大会議室

プログラム：

(1) 蛋白質の構造モデリングとその評価

実習項目：ホモロジーモデリングの実施とモデリング結果の実証方法を学ぶ。

(2) 量子化学計算とリガンド力場の作成と評価

実習項目：低分子リガンドの分子トポロジーと力場を作成する手法を指導し、エネルギー最適化や分子動力学計算の実施によりその評価を行う方法を学ぶ。

(3) 分子動力学による構造サンプリング計算

実習項目：cosgeneプログラムを用いて、分子動力学やマルチカノニカル分子動力学によって、ペプチド、蛋白質、蛋白質複合体等の多様な分子構造を探索し、自由エネルギーを得る手法を学ぶ。

(4) 薬物ドッキング計算

実習項目：Sieveneプログラムの動作機構とソースコードの書き換えのこつ、パラメータの調整方法など

