◆オープンイノベーションセミナー・展示会・マッチング会に出展およびプレゼン

主 催： 大阪市・大阪商工会議所・(財)大阪科学技術センター
後 援： 経済産業省近畿経済産業局／総務省近畿総合通信局／(財)関西経済連合会／(財)大阪都市型産業振興センター／(財)都市活力研究所
協 力： VisLab OSAKA／(独)理化学研究所 計算科学研究機構／(独)海洋研究開発機構／NPO法人バイオグリッドセンター関西
日 時： 2012年2月6日(月)～7日(火)
オープンイノベーションセミナープログラム：

世界最速スーパーコンピューター“京”によるシミュレーション技術の産業応用
(独)理化学研究所 計算科学研究機構 企画部 コーディネーター　伊藤 聡

海底の謎を可視化する！ ～海洋観測と可視化シミュレーション技術～
(独)海洋研究開発機構　技術研究統括　金田 義行

情報・データの可視化 ～自然科学・社会現象等々の可視化事例～
㈱ズームス 代表取締役　保田 充彦

創薬における可視化技術の活用と今後の展開
NPO法人バイオグリッドセンター関西　味村 和洋

科学可視化環境を産学連携で構築する
VisLab OSAKA サイバネットシステム㈱ ビジュアリゼーション部 部長　宮地 英生

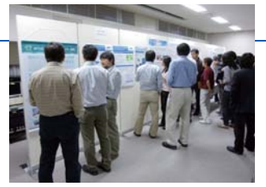
講演&ディスカッション：
可視化サーバーとAR技術の産業応用 ～OIV開設準備室の取組み紹介～
モデレーター：(財)大阪科学技術センター
(仮称)大阪オープン・イノベーション・ヴィレッジ開設準備室
可視化分野プロデューサー　吉川 正晃(サイバネットシステム㈱)

◆文部科学省「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」公開シンポジウムにパネリストとして参加

主 催： 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
日 時： 2012年3月5日(月)10:00～18:20
2012年3月6日(火) 9:00～18:00
場 所： ニチイ学館
プログラム： (3月6日)
10:00～12:00
テーマ「HPCIは生命にどこまで迫れるか」
パネリスト
京都大学大学院 工学研究科 准教授　安達 泰治
(独)理化学研究所 細胞極性統御研究チーム チームリーダー　岡田 康志
東京大学大学院 工学系研究科 教授　高木 周
京都大学大学院 理学研究科 准教授　高田 彰二
(独)理化学研究所 生化学シミュレーション研究チーム チームリーダー　高橋 恒一
13:40～15:40　ポスターセッション
15:50～17:50
テーマ「ISLiMは医療・創薬にどう貢献できるか」
モデレータ
(独)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
パネリスト
横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科 教授　木寺 詔紀
東海大学 医学部 教授　後藤 信哉
NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事　志水 隆一
東京大学 新領域創成科学研究科 教授　杉浦 清了
東京大学大学院 工学系研究科 教授　高木 周
持田製薬㈱ 主事 医薬開発本部／東北大学 工学研究科 客員教授　西島 和三
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
大日本住友製薬㈱ ゲノム科学研究所 分子設計グループマネージャー　山崎 一人

◆PRAGMA2011に出展

日 時： 2011年10月18日(火)～20(木)
場 所： 札幌コンベンションセンター

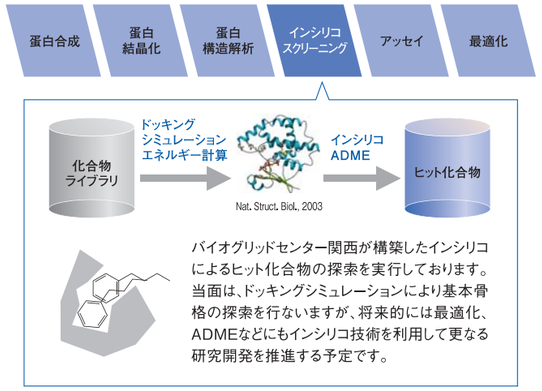


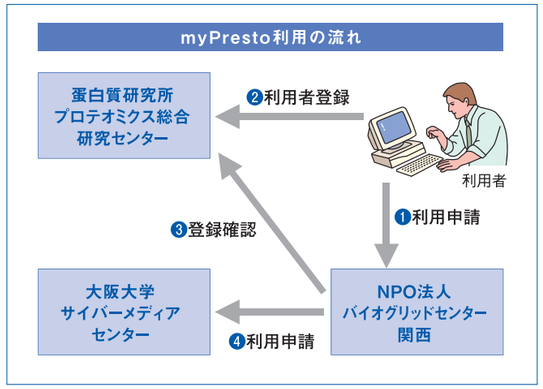
◆バイオインフォマティクス技術者認定試験に協力

日 時： 2011年11月27日(日)13:30～15:30
場 所： (財)都市活力研究所内会議室

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)を使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。





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

2012年5月発行

biogrid

NPO活動報告2012 ［2011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エ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イト

◆創薬バリューチェイン

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「創薬バリューチェイン」を実践しております。

このバリューチェインの全体を利用した実践的な創薬プロジェクトやチェイ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。

創薬バリューチェインプロジェクト採択実績

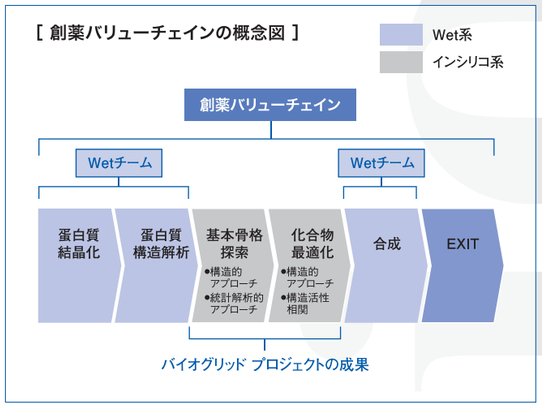
2005年度 ◆知的クラスター創成事業
〔2005年度～2006年度・文部科学省〕

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〕

2011年度は、創薬バリューチェインでこれまで実施したプロジェクトの後継プロジェクトを立ち上げるべくいくつかのプロジェクトに申請しましたが、採択には至りませんでした。2012年度も引き続きプロジェクトに申請する予定です。



◎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科／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シナル情報研究センター／クリングルファーマ(株)／(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：2011年5月28日(土)14:00～18:30　[参加無料]
場 所：(財)都市活力研究所内会議室
主 催：NPO法人バイオグリッドセンター関西
プログラム：

(1) 14:00～14:20
バイオグリッドとHPCI
大阪大学サイバーメディアセンター 教授　下條 真司

(2) 14:20～14:40
HPCI戦略プログラム「予測する生命科学・医療および創薬基盤」の推進
大阪大学蛋白質研究所 教授　中村 春木

(3) 14:40～15:10
戦略分野における創薬への応用
東京大学先端科学技術研究センター 特任教授　藤谷 秀章

(4) 15:10～15:40
HPCIの産業利用について
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営小委員会委員長
(旭硝子㈱ 中央研究所)　高田 章

(5) 15:40～16:10
次世代スパコンの仕様について
(独)理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部
開発グループ システム開発チーム チームリーダー　庄司 文由

(6) 16:10～16:30
FOCUSスパコンの産業利用について
(財)計算科学振興財団 チーフコーディネーター　福田 正大

(7) 16:30～17:00
製薬企業のHPCIへの期待
塩野義製薬㈱ 創薬・探索研究所 先端創薬推進部門長　辻下 英樹

17:00～18:30　交流会

◆CBI／JSBi2011合同大会に出展

日 時：2011年11月8日(火)～10日(木)
場 所：神戸国際会議場
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)
参 加：626名

◆神戸市民講座の開催 (CBI／JSBi2011合同大会にて)

日 時：2011年11月9日(水)
場 所：神戸国際会議場
主 催：NPO法人バイオグリッドセンター関西
共 催：(独)理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム
(財)計算科学振興財団、(財)都市活力研究所、神戸市
参 加：66名
プログラム：

(1) 16:00～16:20
世界最速のスパコン「京」
(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

(2) 16:20～16:55
薬創りに活躍するスパコン
大阪大学大学院 基礎工学研究科
特任教授　坂田 恒昭

(3) 16:55～17:30
医療の世界で活躍するスパコン
大阪大学大学院 基礎工学研究科
機能創成専攻 生体工学領域
教授　野村 泰伸

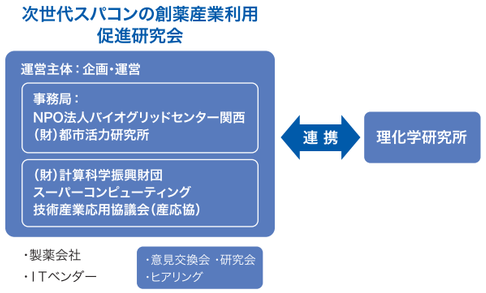
◆HPCIコンソーシアムに参画

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いました。

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いました。2011年度は、7回の産業利用促進検討WGなどに参加し報告書を取りまとめました。

◆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「京」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エア」や「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウエア」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「京」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。2011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のほかに製薬企業に対するアンケートやヒアリングを行いました。ここでの意見は、理化学研究所や大阪大学などの開催するセミナーで公表したり、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しました。

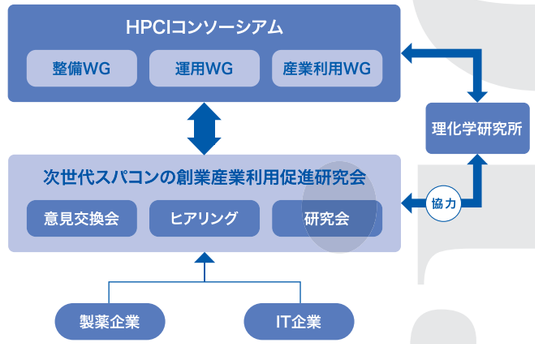


(会議)
日 時：2011年5月12日(木)13:30～15:30
場 所：日本製薬工業協会 会議室
内 容：分子シミュレーションについての説明と意見交換
横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科 教授　木寺 詔紀

(会議)
日 時：2011年8月29日(月)13:00～15:00
場 所：(独)理化学研究所 東京連絡事務所
日 時：2011年8月31日(水)13:00～15:00
場 所：(財)都市活力研究所 セミナールーム
内 容：研究会のこれまでの活動および今後の活動と体制について

(アンケート)
製薬企業に対してアンケート調査を行なった。
期 間：2011年9月1日～30日
対 象：スパコンを利用する主な製薬企業 12社(13部署)

(ヒアリング)
アンケートに引き続いてヒアリングを行なった。
期 間：2011年11月～12月
対 象：スパコンを利用する主な製薬企業 11社



◆京速コンピュータ「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：2011年10月19日(水)13:30～17:30
場 所：阪急グランドビル26F
プログラム：
13:30～13:40　挨拶
大阪大学大学院 基礎工学研究科 教授　田中 正夫

セッション1：計算科学の世界を拓く「京」
(1) 13:40～14:20
予測医学を志向するバイオメカニクスシミュレーション
大阪大学大学院 基礎工学研究科 教授　田中 正夫

(2) 14:20～15:00
インシリコ創薬の新機軸：3D-RISM理論(溶媒和の統計力学)に基づくリガンドマッピング法
(独)理化学研究所 生命システム研究センター 上級研究員　今井 隆志

セッション2：「京」の産業利用に迫る
(1) 15:20～15:55
検査診断領域へのHPCI活用に向けた取り組み
シスメックス㈱ 中央研究所 主任研究員　高地 泰浩

(2) 15:55～16:30
創薬研究におけるスパコン利用について
大日本住友製薬㈱ ゲノム科学研究所 分子設計グループマネージャー　山崎 一人

(3) 16:40～17:30
スーパーコンピュータ京への期待
～製薬業界の産業利用ニーズと今後の展望～
大阪大学大学院 基礎工学研究科 特任教授　坂田 恒昭、
NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事　志水 隆一

日 時：2012年1月25日(水)13:30～17:40
場 所：東京国際フォーラム
総合司会：大阪大学大学院 基礎工学研究科 特任教授　坂田 恒昭
プログラム：
13:30～13:40　挨拶
大阪大学大学院 基礎工学研究科 教授　田中 正夫

セッション1：計算科学の世界を拓く「京」
(1) 13:40～14:20
スパコン「京」の設計思想と生命科学への展開
(独)理化学研究所 計算分子設計研究G グループディレクター　泰地 真弘人

(2) 14:20～15:00
「京」を活用した計算生命科学プロジェクト
横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科 教授　木寺 詔紀

(3) 15:00～15:40
「京」による細胞分化解明のための大規模生体分子ネットワーク解析
大阪大学大学院 情報科学研究科 教授　松田 秀雄

セッション2：「京」の産業利用に迫る
(1) 16:00～16:20
「京」に寄せる期待 ～創薬の現場から～
第一三共㈱ 機能分子第2研究所 第5グループ 主任研究員　中尾 直樹

(2) 16:20～16:40
創薬企業における計算化学の現状と今後への期待
塩野義製薬㈱ 創薬・探索研究所 先端創薬推進部門長　辻下 英樹

(3) 16:40～17:00
創薬の現場がスパコンに期待すること
武田薬品工業㈱ 医薬研究本部 探索研究所 リサーチマネジャー　田中 稔祐

(4) 17:00～17:40
「京」への期待と産業界、学界から「京」利用への道
～製薬業界の産業利用ニーズ調査結果を踏まえ～
NPO法人バイオグリッドセンター関西((財)都市活力研究所)理事　志水 隆一