

ヒューマン・オルガノイド生命医学と 情報・数理科学の融合研究

大阪大学ヒューマン・メタバーサ疾患研究拠点
申請代表：渡場 康弘

研究テーマタイトル:

MDシミュレーションを用いたキナーゼ変異の機構的理解

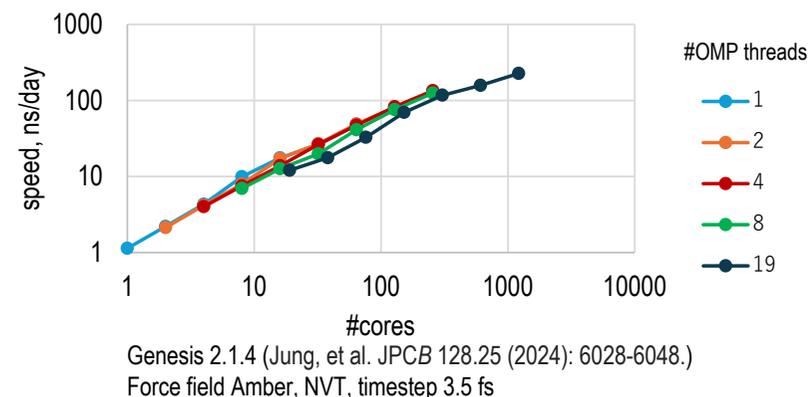
参加者 (氏名・所属)

1. 信夫 愛・大阪大学WPI-PRIME
2. Yichao Wu・大阪大学WPI-PRIME
3. Mohamed Marzouk Sobaih・大阪大学WPI-PRIME

研究概要

EGFR、ABL、SRC、Alk などのプロテインキナーゼについて、構造・動態・阻害剤結合への変異の影響を調べるため、分子動力学 (MD) シミュレーションを実施しています。アポ型と阻害剤結合型、モノマーとダイマー、活性型と不活性型など複数の構造状態において変異を導入し、それらの違いが機能や疾患メカニズムとどのように関係するかを明らかにすることを目的としている。その第一段階として、Alkキナーゼドメインを対象に、GENESIS 2.1.4 を用いたベンチマーク計算をSQUIDスーパーコンピュータ上で実施し、異なるハードウェア構成に対する最適な実行条件を探索した。

Alk kinase+nanobody in solution
(75,670 atoms)



網膜オルガノイド表現型データの画像解析法の開発

- 渡邊敦士(医学系研究科), 小藤良太(医学系研究科最先端イノベーションセンター), 竹本智子(PRIME), 道川 隆士(PRIME), 横田秀夫(PRIME), 西田幸二(医学系研究科, PRIME)
- 研究概要
 - 西田研究室で培養された網膜オルガノイドの顕微鏡画像をもとに, 横田研では画像処理技術および機械学習を活用した細胞形態及び動態の定量解析を行っている. 具体的には, 画像内から網膜オルガノイド内に存在する特定の細胞を自動的に抽出し, その数を正確に計測する手法を開発している. これにより, 細胞の構造的特徴や発達状態を定量的に把握することが可能となり, 網膜オルガノイドの状態評価や発生メカニズムの理解に貢献することを目指す.
 - 本プロジェクトでは, 西田研, 横田研の2拠点間での顕微鏡画像や解析結果の共有を目的としてONIONを使用した. 現在のデータ量(678ファイル, 約4GB).

肝細胞の分化や疾患時の再生に関わる転写制御ネットワーク シングルセルデータ解析のための環境構築

氏名: 松井理司

所属: ヒューマン・メタバース疾患研究拠点 (RPIMe) オルガノイド毒性学

研究内容

公共および自ら得たシングルセルトランスクリプトームデータより、肝発生、再生応答、加齢時に変動する転写制御ネットワークを同定し、オルガノイドに実装することでより正確性の高いヒト疾患や加齢モデルの作出を目指す。

シングルセルデータ解析のための環境構築をSQUIDのFrontend、解析前後のデータの保存をONIONで行なった。
多数のシングルセル解析用のツールを格納しているShortCakeをSingularity環境下で用いるための準備を行なった。
<https://github.com/rnakato/ShortCake>