

# Supercomputational Life Science 2015 (SCLS2015)

Takeda Hall, Takeda Sentanchi Building, The University of Tokyo

## DAY1 International Workshop on Current Topics

<b>Tuesday, October 20, 2015</b>	
9:30 – 10:00	<b>Registration</b>
10:00 – 10:20	<b>Opening Remarks</b>
10:00 – 10:10	Yoichiro Matsumoto, RIKEN
10:10 – 10:20	Toshio Yanagida, RIKEN
10:20 – 11:30	<b>Session 1: Challenge for the Slow Motions of Biomolecules by Advanced MD Simulation Methods</b> (Session Chair: Yuji Sugita, RIKEN)
10:20 – 10:50	<b>Impact on Nucleosome Dynamics via Histone Variants and Post-Translational Modifications</b> Hidetoshi Kono, Japan Atomic Energy Agency
10:50 – 11:30	<b>Millisecond Dynamics of RNA Polymerase II Translocation at Atomic Resolution</b> Xuhui Huang, The Hong Kong University of Science and Technology
(90 minutes)	<b>Lunch</b> (and Poster Set-Up)
13:00 – 14:10	<b>Session 2: GROMACS: Its Applications and Future</b> (Session Chair: Hideaki Fujitani, The University of Tokyo)
13:00 – 13:30	<b>Molecular Simulation for Antibody Drug Development</b> Keiko Shinoda, The University of Tokyo
13:30 – 14:10	<b>The Path to Exascale Molecular Simulation: Parallelization, Acceleration, and Ensemble Simulation Techniques to Understand Biological Macromolecules</b> Erik Lindahl, Stockholm University and KTH Royal Institute of Technology
14:10 – 15:10	<b>Poster Session</b> (and Coffee Break)
15:10 – 16:20	<b>Session 3: Integrated Simulation of the Basal Ganglia Circuit for Understanding Its Function and Pathology</b> (Session Chair: Shu Takagi, The University of Tokyo)
15:10 – 15:40	<b>Can an Integrated Model of the Basal Ganglia-Thalamo-Cortico-Spinal Network and the Musculoskeletal System Reproduce Healthy and Pathological Motor Behaviors?</b> Kenji Doya, Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University
15:40 – 16:20	<b>Sensing Positive Versus Negative Reward Related Signals in the Direct and Indirect Basal Ganglia Pathways - A Computational Investigation of Read-Out Mechanisms</b> Jeanette Hellgren Kotaleski, KTH Royal Institute of Technology
(20 minutes)	<b>Coffee Break</b>
16:40 – 17:50	<b>Session 4: Biomedical Big Data Analysis</b> (Session Chair: Hideo Matsuda, Osaka University)
16:40 – 17:20	<b>Breast Cancer Phenotype Characterization by Network-Based Omics Data Analysis</b> Sun Kim, Seoul National University
17:20 – 17:50	<b>Supercomputers for Cancer Research and Cancer Big Data</b> Satoru Miyano, The University of Tokyo
18:00 – 20:00	<b>Reception</b>

DAY2 : 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」成果報告会

<b>10月21日(水)</b>	
9:00 – 9:30	<b>受付</b>
9:30 – 9:45	<b>オープニング</b>
9:30 – 9:35	工藤雄之 (文部科学省 研究振興局 参事官 (情報担当) 付 計算科学技術推進室 室長)
	柳田敏雄 (理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム)
9:35 – 9:45	
9:45 – 11:35	研究報告 課題 1「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」 杉田有治 (理化学研究所杉田理論分子科学研究室)
(1 時間 50 分)	バクテリア細胞質の全原子分子モデルと大規模分子動力学シミュレーション 杉田有治 (理化学研究所杉田理論分子科学研究室)
GL : 30 分	上皮成長因子応答経路の 1 分子粒度シミュレーション 高橋恒一 (理化学研究所生命システム研究センター)
PI : 15 分×4=60 分	リン酸化酵素反応機構の理解に向けた自由エネルギー解析 林重彦 (京都大学大学院理学研究科)
質疑 計 20 分	MD-SAXS 法を用いた核内 DNA 結合タンパク質の機能構造シミュレーション 池口満徳 (横浜市立大学生命医科学研究科)
	粗視化分子モデルを用いたリン酸化酵素複合体とクロマチンの動的モデリング 高田彰二 (京都大学大学院理学研究科)
11:35 – 12:15	研究報告 課題 2「創薬応用シミュレーション」 藤谷秀章 (東京大学先端科学技術研究センター)
GL : 25 ~ 30 分	リガンドによるタンパク質の構造変化と結合自由エネルギー
質疑 10 ~ 15 分	藤谷秀章 (東京大学先端科学技術研究センター)
12:15 – 13:15	<b>昼食</b>
13:15 – 14:15	<b>ポスターセッション</b>
14:15 – 16:05	研究報告 課題 3「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」 高木周 (東京大学大学院工学系研究科)
(1 時間 50 分)	抗血小板薬効予測のためのマルチスケール血栓症シミュレーションと筋繊維の集合体としての骨格筋のシミュレーション 高木周 (東京大学大学院工学系研究科)
GL : 30 分	抗血小板薬効予測を可能とする階層統合シミュレータの開発に向けたモデリング 後藤信哉 (東海大学医学部内科学系)
PI : 15 分×4=60 分	心疾患の合理的治療のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション 久田俊明 (株式会社 UT-Heart 研究所)
質疑 計 20 分	ヒトの運動器、運動神経、感覚神経からなるシステムの統合シミュレーション 中村仁彦 (東京大学大学院情報理工学系研究科)
	コンプライアントな生体筋・腱系に駆動されるヒト骨格系の運動制御に対して大脳基底核が果たす役割の数理モデル化 野村泰伸 (大阪大学大学院基礎工学研究科)
(10 分)	<b>休憩</b>
16:15 – 17:25	研究報告 課題 4「大規模生命データ解析」 宮野悟 (東京大学医科学研究所)
(1 時間 10 分)	大規模生命データ解析 : 「京」で初めて見えた世界 宮野悟 (東京大学医科学研究所)
GL : 25 ~ 30 分	大規模生体分子ネットワーク解析による脂肪細胞のエネルギー消費への転換機構の解明 松田秀雄 (大阪大学大学院情報科学研究科)
PI : 15 分×2=30 分	次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発 秋山泰 (東京工業大学大学院情報理工学研究科)
質疑 10 ~ 15 分	
(10 分)	<b>休憩</b>
17:35 – 18:15	成果報告「計算生命科学の教育とアウトリーチ - 現在と未来 -」 江口至洋 (理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム)
(40 分)	
18:15 – 18:25	<b>クローニング・ポスター賞発表</b>