

## **IPR Seminar: New Era of Biosimulations with Supercomputers**

**Cosponsored by BioSuperComputing Research Community**

**Date: March 4 (Friday) - March 5 (Saturday), 2011**

**Place: Institute for Protein Research (IPR) Osaka Univ., 1F Lecture Hall**

**Organizers: Haruki Nakamura (IPR, Osaka Univ.) and Ryutaro Himeno (RIKEN)**

### **March 4 (Friday) (All the lectures will be made in English.)**

13:00-13:05 Haruki Nakamura (IPR, Osaka Univ.) Opening Remark

13:05-13:50 Akinori Kidera (Yokohama City Univ.)

"Supercomputing of protein systems using innovative algorithms for multiscale simulations"

13:50-14:35 Xin-Qiu Yao (Kyoto Univ.)

"Drug export and allosteric coupling in a multidrug transporter revealed by molecular simulations"

14:35-15:20 Makoto Taiji (RIKEN)

"K-computer and MDGRAPE-4"

15:20-15:35 Coffee Break

15:35-16:20 Yibing Shan (D.E. Shaw Research)

"How molecular dynamics simulations may be applied to the structure-based design of kinase drugs."

16:20-17:05 Nikolay V. Dokholyan (Univ. North Carolina)

"Multiscale modeling and design of biological molecules"

17:05-17:50 Yoshinori Tamada (Univ. Tokyo)

"Large-scale gene network estimation algorithms with high performance computing"

17:50-17:55 Ryutaro Himeno (RIKEN) Closing Remark

18:00 Gathering

### **March 5 (Saturday) (All the lectures will be made in Japanese.)**

**ワークショップ: 分子シミュレーションと細胞内ネットワーク解析の実際**

9:30-10:45 大野 洋介 (理研)

次世代スーパーコンピューター「京」にむけた分子動力学コードの最適化

10:45-12:00 米澤 康滋 (阪大蛋白研)、山中 秀介 (阪大理)、中田 一人 (NEC)

Platypusによるhybrid-QM/MDとDFTによる超並列計算

12:00-13:00 Lunch

13:00-14:15 高田 彰二 (京大理)

粗視化生体分子シミュレータCafeMol

14:15-15:30 角田 達彦 (理研・ゲノム医科学研究センター)

全ゲノム解析による医科学研究の飛翔 - GWASと次世代シーケンサー

**事前登録不要・聴講無料**

連絡先 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2

大阪大学蛋白質研究所・蛋白質情報科学研究系

中村 春木 E-MAIL: harukin@protein.osaka-u.ac.jp, TEL: 06-6879-4311