

生命分野：活動状況

- 白書

- 各著者に依頼して、内容のアップデート
- 今回のフォーマットに合わせた
- 問題点：参考文献が不十分な点がある

- アプリ提出状況

- 分子のMARBLEについては、バージョンアップ版を再提出
- 次世代シーケンサ系を2月に出せそう(玉田さんからの情報)

生命分野：学会議論状況

- 日本生物物理学会
 - 2012年9月22日(土)～24日(月) 名古屋大学
 - 生命分野ロードマップ紹介(杉田さん)
- 計算物質科学イニシアティブ(CMSI) 計算分子科学研究拠点 第3回研究会
 - 2012年10月9日 岡崎
 - 生命分野ロードマップ紹介(杉田さん)
- バイオスーパーコンピューティング研究会
 - 2012年10月19日 東京大学
 - 生命分野ロードマップ・調査研究紹介, 議論(池口)
- 新学術領域研究「システムがん」の講演会
 - 2013年3月10日 大阪 パネルディスカッション, 玉田, 池口
 - 「京」の次のスーパーコンピュータ ～がん研究を飛躍的に進めるために～
- 日本蛋白質科学会
 - 2013年6月12日(水)～14日(金) 鳥取
 - 横断的分野でシンポジウムを実施
- 情報計算化学生物学会(CBI)研究会：創薬関連
 - 2013年6月27日
 - 講演中にロードマップ紹介検討(池口)

横断的分野（タンパク質構造）執筆

• x. 分野横断的課題

- x. x. タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析
- x. x. 1 タンパク質構造に関する分野横断の意義（イントロのようなもの）
担当：池口、藤堂、高木
 - 「生命科学」「物質科学」「ものづくり」分野の境界に位置した横断的課題である。
 - ここでは、代表的な例を挙げつつ、分野横断の意義を説明する。
- x. x. 2 創薬シミュレーション 担当：山下、北浦
 - より物質科学・生命科学の境界からみたときの「創薬」について語る。
 - 量子化学(FMO, QM/MM), 統計力学的アプローチ(MD)など..
- x. x. 3 バイオナノ境界ものづくりシミュレーション 担当：望月、山崎
 - 生体親和性の高い医療用インプラント, アパタイトなどのバイオミネラリゼーション, 人造抗体, DNAを利用した医療用診断センサー等のバイオセンサー
- x. x. 4 ウイルスや細胞動態などの巨大系シミュレーション
担当：吉井、杉田
 - 次世代スパコンが実現できると、巨大な系からなる生命現象のまるごとシミュレーションが可能になってくる。

横断的分野：蛋白質科学会でのシンポジウム

- 日本蛋白質科学会
 - 蛋白質に関わる実験・理論研究者の学会
 - 2013年6月12日(水)～14日(金) 鳥取
- エクサフリップス時代の計算蛋白質科学
 - 6月12日(水) D会場(150席予定)
 - 池口満徳(横浜市立大学)全体概要説明
 - 杉田有治(理化学研究所)細胞系計算
 - 吉井範行(名古屋大学)ウイルス巨大系計算
 - 山下雄史(東京大学)創薬計算
 - 望月祐志(立教大学)バイオセンサー等設計

SACLA (XFEL)との連携

- 白書

- 高輝度光科学研究センター (JASRI) の城地保昌さんに依頼して、執筆してもらった
- 実験側の中迫先生も参加
- 章立て
 - 課題の必要性
 - 連携方法1【大量データ解析による4次元イメージング】
 - 連携方法2【分子レベルシミュレーションとの連携】
 - 使用するアプリケーションと要求性能