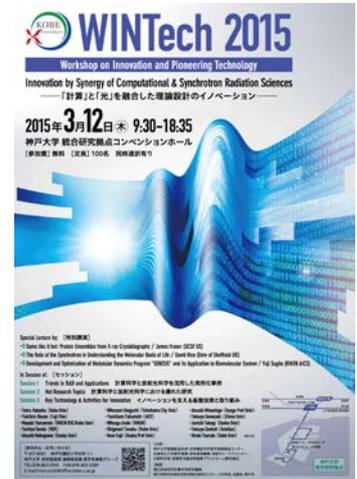


## 国際ワークショップ「WINTech 2015」

Innovation by Synergy of Computational & Synchrotron Radiation Sciences  
～「計算」と「光」を融合した理論設計のイノベーション～

科学技術立国である日本においては様々な先進的な研究開発インフラが整備されています。特に計算科学分野においては、世界最高レベルの性能を誇る「京コンピュータ」と同じく世界最大規模の放射光施設 SPring-8 や Photon Factory などが設置されています。国の方針として、ポスト京計画・SPring-8 II 計画など、これらの先進インフラも今後 10 年間の間にさらに機能的に進化していきます。医薬品開発や材料開発などにおいて、これらの科学インフラを活用した産業界と連携したイノベーションの創出が求められています。インフラ群の最大限に活用するためには、「計算科学」と放射光と分光学を含む「光科学」における研究の融合が重要であるとの認識が広まっています。今年度の WINTech は、国内の放射光科学・計算科学の優れた研究例とそれらの融合による成果の紹介を通じ、イノベーション創出につながるネットワーク形成を促進させることを目的として本ワークショップを開催します。



日時：2015年3月12日（木） 9：30～18：35

会場：神戸大学 総合研究拠点コンベンションホール

主催：神戸大学連携創造本部・応用構造科学産学連携推進センター、兵庫県立大学産学連携・研究機構・放射光ナノテクセンター、文部科学省・創薬等支援技術基盤プラットフォーム解析拠点

後援：理化学研究所計算科学研究機構、理化学研究所放射光科学総合研究センター、CBI学会、兵庫県、神戸市

参加登録：【締切日】 2015年3月6日（金）

参加費：無料 定員：100名程度

使用言語：英語・日本語（同時通訳有）

参加申込：[hicd-ccrd3@office.kobe-u.ac.jp](mailto:hicd-ccrd3@office.kobe-u.ac.jp) へ、以下の項目を記載の上メールにてお申込み下さい。

- メールタイトル 【WINTech2015 参加申し込み】
- 氏名（ふりがな）
- 勤務先/所属名/職名
- 住所/E-mail/Tel

申し込み・問い合わせ先

〒657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1 神戸大学 研究推進部 連携推進課 産学官連携グループ

Tel: 078-803-5945 Fax: 078-803-5389 E-mail: [hicd-ccrd3@office.kobe-u.ac.jp](mailto:hicd-ccrd3@office.kobe-u.ac.jp)



# WINTech 2015

Workshop on Innovation and Pioneering Technology

Innovation by Synergy of Computational & Synchrotron Radiation Sciences

——「計算」と「光」を融合した理論設計のイノベーション——

2015年3月12日(木) 9:30-18:35

神戸大学 統合研究拠点コンベンションホール

[参加費] 無料 [定員] 100名 同時通訳有り

Special Lecture by: [特別講演]

- Some like it hot: Protein Ensembles from X-ray Crystallography / James Fraser (UCSF US)
- The Role of the Synchrotron in Understanding the Molecular Basis of Life / David Rice (Univ of Sheffield UK)
- Development and Optimization of Molecular Dynamics Program "GENESIS" and its Application to Biomolecular System / Yuji Sugita (RIKEN AICS)

In Session of: [セッション]

- Session 1 Trends in R&D and Applications 計算科学と放射光科学を活用した実用化事例
- Session 2 Hot Research Topics 計算科学と放射光科学における最新の研究
- Session 3 Key Technology & Activities for Innovation イノベーションを支える基盤技術と取り組み

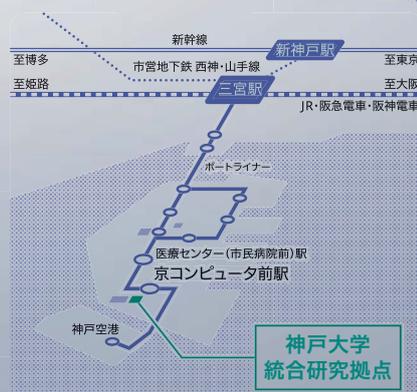
- |   |   |                                       |
|---|---|---------------------------------------|
| • Tohru Kataoka (Kobe Univ)             | • Mitsunori Ikeguchi (Yokohama City Univ) | • Atsushi Mineshige (Hyogo Pref Univ) |
| • Yukihiko Okuno (Fuji Film)            | • Yoshifumi Fukunishi (AIST)              | • Tatsuya SawaSaki (Ehime Univ)       |
| • Masaki Yamamoto (RIKEN RSC/Kobe Univ) | • Mitsugu Araki (RIKEN)                   | • Junichi Takagi (Osaka Univ)         |
| • Toshiya Senda (KEK)                   | • Shigenori Tanaka (Kobe Univ)            | • Hiroki Tsuruta (Kobe Univ) (順不同)    |
| • Atsushi Nakagawa (Osaka Univ)         | • Ikuo Fujii (Osaka Pref Univ)            |                                       |

[参加申込・お問い合わせ]  
 〒 657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1  
 神戸大学 研究推進部 連携推進課 産学官連携グループ  
 TEL:078-803-5945 FAX:078-803-5389  
 E-mail:hicd-ccrd3@office.kobe-u.ac.jp



[主催]  
 神戸大学連携創造本部・応用構造科学産学連携推進センター、  
 兵庫県立大学産学連携・研究推進機構・放射光ナノテクセンター、  
 文部科学省・創薬等支援技術基盤プラットフォーム解析拠点

[後援]  
 理化学研究所計算科学研究機構、  
 理化学研究所放射光科学総合研究センター、CBI学会、兵庫県、神戸市



# WINTech2015 Program March 12<sup>th</sup>

<b>Registration</b> 9:00~	
<b>Opening Remarks</b> 9:30~	Dr. Kazunori Uchida, Vice President, Kobe University Dr. Isao Ohta, Vice President, University of Hyogo
<b>Special Lecture 1</b> 9:40~11:00	<b>Some like it hot : Protein Ensembles from X-ray Crystallography</b> Dr. James S. Fraser Assistant Professor, Department of Bioengineering and Therapeutic Sciences, University of California, San Francisco & California Institute for Quantitative Biosciences  <b>The role of the Synchrotron in understanding the molecular basis of Life</b> Dr. David Rice Harrison Chair in Structural Biology, Krebs Institute for Biomolecular Research Department of Molecular Biology and Biotechnology, Sheffield University U.K
<b>Session 1</b> 11:00~11:40	<b>【 Trends in R&amp;D and Applications 】</b>  <b>1. Structure-based drug design of anti-cancer compounds targeting Ras oncoproteins</b> Dr. Tohru Kataoka Professor and Dean, Kobe University Graduate School of Medicine  <b>2. First-Principles Molecular Dynamics Study on Chemical Reactions of Electrolytes and Additives in Lithium Ion Battery by using K-computer</b> Dr. Yukihiro Okuno Research Scientist, FUJIFILM Corporation
11:40~13:30	Lunch
<b>Special Lecture 2</b> 13:30~14:10	<b>Optimization of Molecular Dynamics Program “GENESIS” and its Application to Biomolecular System</b> Dr. Yuji Sugita Chief Scientist, Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN
<b>Session 2</b> 14:10~17:00	<b>【 Hot Research Topics 】</b>  <b>1. Platform for Drug Discovery, Informatics, and Structural Life Science</b> Dr. Toshiya Senda Director of Structural Biology Reserch Center /Professor, Structural Biology Reserch Center, Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK)  <b>2. Macromolecular crystallography at SPring-8 and SACLA</b> Dr. Masaki Yamamoto Division Director, Advanced Photon Technology Division, RIKEN SPring-8 Center, RIKEN  <b>3. Structure Determination of Biological Macromolecules by X-ray</b> Dr. Atsushi Nakagawa Professor, IPR, Osaka University, CREST-JS  <b>4. MD-SAXS analysis for biomolecules</b> Dr. Mitsunori Ikeguchi Assistant Professor, Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City Univ.

<p>15:30~15:40</p>	<p style="text-align: center;">【 Discussion / Coffee 】 (10mins)</p> <p><b>5. Application of NMR to molecular simulation: myPresto software</b>  Dr. Yoshifumi Fukunishi  Molecular-Recognition Structure Analysis Team leader, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Molecular Profiling Research Center for Drug Discovery (molprof)</p> <p><b>6. K supercomputer-based drug discovery project by Biogrid pharma consortium</b>  Dr. Mitsugu Araki  Research Scientist, Advanced Institute for Computational Science, RIKEN</p> <p><b>7. FMO Pharmaceutical Applications</b>  Dr. Shigenori Tanaka  Professor, Graduate School of System Informatics, Department of Computational Science, Kobe University</p> <p><b>8. Characterization of an indispensable iron impurity in oxyapatite ceramics for its fuel cell application - Powerful techniques using microbeam synchrotron radiation-</b>  Dr. Atsushi Mineshige  Associate professor, Graduate School of Engineering, University of Hyogo</p>
<p>17:00~17:10</p>	<p style="text-align: center;">【 Discussion / Coffee 】 (10mins)</p>
<p><b>Session 3</b>  17:10~18:20</p>	<p style="text-align: center;">【 Key Technology &amp; Activities for Innovation 】</p> <p><b>1. Boosting the protein production pipeline by the use of custom-made epitope tag system</b>  Dr. Junichi Takagi  Professor, Osaka University, Institute for Protein Research</p> <p><b>2. Wheat cell-free system for drug discovery platform</b>  Dr. Tatsuya Sawasaki  Professor, Proteo-Science Center, Ehime University</p> <p><b>3. Post-antibody drugs: Generation of molecular-targeting peptides “MicroAntibodies” by phage-displayed libraries</b>  Dr. Ikuo Fujii  Professor, Dept. of Biological Science, Osaka Prefecture University</p> <p><b>4. Interaction among Academia and Industries: Role Center for Applied Structural Science CASS</b>  Dr. Hiroki Tsuruta  Director of CASS/Associate Professor, CASS, CREATE, Kobe University</p>
<p><b>Closing Remarks</b>  18:20~</p>	<p>Dr. Masasuke Yoshida  Program Officer, Platform for Drug Discovery, Informatics, and Structural Life Science</p>