

平成13年度スーパーコンピュータワークショップ

2002年のスーパーコンピュータワークショップを、平成14年3月5日(火)、6日(水)に開催しました。68名の参加者があり、活発な討論が行われました。

| | |
|------|----------------------|
| タイトル | 「分子科学とバイオサイエンスの接点」 |
| 日時 | 平成14年3月5日(火)～3月6日(水) |
| 場所 | 計算科学研究センター2階大会議室 |

メーカー資料 (PDFファイル) をダウンロードできます。

- 富士通株式会社「富士通のバイオインフォマティクスへの取り組み」 (5.3MB)
- 日本電気株式会社「NECのHPCへの取り組み」 (1.4MB)
- 日本電気株式会社「SX-6シリーズハードウェアのご紹介」 (1.2MB)
- 日本SGI株式会社「グリッドコンピューティング」 (2.5MB)
- 日本SGI株式会社「ビジュアルエリアネットワーキング」 (7.6MB)

- 講演プログラム -

3月5日(火)

| | | |
|-------------|------------------------------------|--------------------|
| 13:30-13:40 | Open remark | 平田 文男 (計算科学研究センター) |
| 座長 : 南部 伸孝 | | |
| 13:40-14:10 | 「フェリチン分子への多イオン透過過程におけるエネルギー障壁の計算」 | 高橋 卓也 (計算科学研究センター) |
| 14:10-14:40 | 「serin proteaseにおける酵素触媒反応」 | 石田 豊和 (京大院理) |
| 14:40-15:10 | 「タンパク質の励起移動・電子移動・励起状態ダイナミクス」 | 倭 剛久 (名大院理) |
| 15:10-15:40 | 「分子動力学シミュレーション専用計算機MDMによるバイオサイエンス」 | 戎崎 俊一 (理研) |
| 15:40-15:55 | (coffee break) | |
| 座長 : 高見 利也 | | |
| 15:55-16:55 | 「富士通のBioinformaticsへの取り組み」 | 奥田 基 (富士通) |
| 16:55-17:00 | (休憩) | |
| 17:00-18:00 | 「NECのHPCへの取り組み」 | 花村 光泰 (日本電気) |
| 18:30-20:30 | 懇親会 | |

3月6日(水)

| | | |
|-------------|---|--------------------|
| 座長 : 青柳 睦 | | |
| 9:30-10:00 | 「分極モデルポテンシャル関数を用いた生体分子の理論研究」 | 中川 節子 (金城学院大) |
| 10:00-10:30 | 「CUFF(Consistent Charge Equilibration with Universal Force Filed)の開発と色素増感型太陽電池への応用」 | 北尾 修 (産総研) |
| 10:30-11:00 | 「ヒトゲノム解析センターのスーパーコンピュータシステム」 | 中井 謙太 (東大医科研) |
| 11:00-11:30 | 「蛋白質計算科学とグリッド技術」 | 中村 春木 (阪大蛋白研) |
| 11:30-12:00 | 「熱力学的積分法による自由エネルギープロファイルの計算 - 生体膜を横切る物質透過とタンパク質のコンフォメーション変化 -」 | 岡崎 進 (計算科学研究センター) |
| 12:00-13:15 | (昼食) | |
| 座長 : 高橋 卓也 | | |
| 13:15-13:45 | 「計算分子科学で解明する蛋白質の熱安定性と基質認識」 | 斎藤 稔 (弘前大理工) |
| 13:45-14:15 | 「溶媒中における蛋白質の立体構造予測: 拡張アンサンブル法とRISM理論の複合アプローチ」 | 木下 正弘 (京大エネルギー理工研) |

| | | |
|--------------------|--|----------------------|
| 14:15-14:45 | 「タンパク質立体構造予測:粗視化モデルによる物理化学的アプローチ」 | 藤墳 佳見 (神戸大院 自然科学) |
| 14:45-14:50 | (休憩) | |
| 座長 : 南野 智 | | |
| 14:50-15:50 | 「グリッドコンピューティング - SGIの取り組みとそのテクノロジー - 」 | 戸室隆彦 (日本SGI) |
| 15:50-15:55 | End remark | 平田文男 (計算科学研究センター) |

このページに関する質問要望は、[計算科学研究センター](#)までお問い合わせ下さい。