

## 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)

<b>14:15-14:45</b>	「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)
<b>14:45-14:50</b>	(休憩)	
<b>座長 : 南野 智</b>		
<b>14:50-15:50</b>	「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)
<b>15:50-15:55</b>	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。