

## 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ィールの計算 - 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）                                   |                   |
| 座 長 ： 南 野 智        |  |                   |
| <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。