

## 「シミュレーション、インフォマティクス、AIによる生体分子科学の最前線」

開催日: 2024年 1月15日 (月) - 1月16日 (火)

開催方法: ハイブリッド形式 (現地+zoom配信)

会場: 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

<http://www.orion.ac.jp/occ/>

参加費: 無料

定員: 100名 (現地参加)

500名 (Zoomウェビナー参加)

当計算科学研究センターでは、スーパーコンピュータシステムを全国の研究者に共同利用して頂いています。当センターのスーパーコンピュータシステムの高速かつ大規模な計算環境は分子科学、物性科学、生物科学などを含む広範な分野の研究に活用されてきております。

また、当センターでは例年、理論・計算分子科学に関するワークショップを開催してきております。今年度は、「シミュレーション、インフォマティクス、AIによる生体分子科学の最前線」をテーマとして、四年ぶりの現地開催 (Zoomでの同時配信あり) でのワークショップを企画しました。生体分子の計算科学分野で先進的な研究に取り組んでおられる方々を講師にお招きし、最新の成果、これからの可能性や展望をご紹介いただけます。さらに、実験研究者の方や大学院生の皆さんにも幅広く参加していただけるようポスター発表 (現地のみ) も企画しました。

参加希望者の方は下記参加登録申し込みページより必要事項をご記入の上、お申し込みください。

\* 参加のための必要情報 (Zoom ID、PW情報等) はメールにてご連絡いたします。

## プログラム (\*敬称略)

## 1日目 2024年1月15日 (月)

|             |                |  |
|-------------|----------------|--|
| 12:45-13:30 | 受付             |  |
| 13:30-13:40 | はじめに 所長挨拶      |  |
| 13:40-14:20 | 長岡 正隆 (名古屋大学)  | 「溶液や生体分子におけるpH依存現象の理論的予測に向けて: Red Moonアプローチ」   |
| 14:20-15:00 | 小野 純一 (早稲田大学)  | 「量子分子動力学法による生体化学反応機構の解明」                       |
| 15:00-15:40 | 吉田 紀生 (名古屋大学)  | 「3D-RISM理論と分子シミュレーションによる生体分子の構造と機能の解析手法の開発と応用」 |
| 15:40-16:00 | 休憩             |  |
| 16:00-16:40 | 原田 隆平 (筑波大学)   | 「生体機能を紐解く分子シミュレーション手法の開発と応用」                   |
| 16:40-17:20 | 千見寺 浄慈 (名古屋大学) | 「デザインしやすいタンパク質フォールドの条件探索と新規フォールドタンパク質デザイン」     |
| 17:20-18:30 | ポスター発表         |  |
| 18:30-20:00 | 懇親会            |  |
|             |                |  |

## 2日目 2024年1月16日 (火)

|             |                |                                    |
|-------------|----------------|------------------------------------|
| 09:30-10:10 | 山本 詠士 (慶應義塾大学) | 「マルチスケール分子シミュレーションで迫る生体分子の不均一拡散現象」 |
| 10:10-10:50 | 森次 圭 (大阪公立大学)  | 「生体分子に向けたシミュレーション法の開発とその応用研究」      |
| 10:50-11:10 | 休憩             |                                    |
| 11:10-11:50 | 西 羽美 (東北大学)    | 「AIとゲノム科学で探るSLCトランスポーターファミリー」      |
| 11:50-12:30 | 太田 元規 (名古屋大学)  | 「大きな生体高分子複合体のバイオインフォマティクス」         |
| 12:30-12:35 | おわりに           |                                    |

## ポスター発表

|      |  |  |
|------|--|--|
| P-1  | 化合物空間の物質的非対称性の理論構築   | (分子科学研究所) ○白男川貴史, サイモン・レオン・クリュック, 江原正博, アナトール・ヴァン・リーレンフェルト |
| P-2  | 天然変性タンパク質の分子動力学シミュレーションによるタンパク質進化解析                          | (早稲田大学大学院) ○青木志穂, 森 涉, 朝日 透, 小野寺 航                         |
| P-3  | ピロールの位置選択的トリシアノビニル化における反応機構解析                                | (高知大学大学院) ○飛鷹絢子, 佐々木義章, 高橋大空, 有澤佐織, 谷 涼太, 金野大助             |
| P-4  | 有機試薬を用いた1,5-ジエン化合物の分子内環化反応についての理論研究                          | (高知大学大学院) ○小川渉太郎, 金野大助                                     |
| P-5  | チオアミド誘導体を用いたスルフィド合成の反応機構解析                                   | (高知大学大学院) ○昌本 麗, 吉永有佑, 金野大助                                |
| P-6  | 分子内求電子置換反応によるテトラヒドロフルオレン合成の反応機構解析                            | (高知大学大学院) ○浅野真守, 金野大助                                      |
| P-7  | ミトコンドリア型ATP合成酵素の阻害因子IF1が示す回転方向依存的な制御機構:1分子操作実験と分子動力学シミュレーション | (分子科学研究所) ○小林稜平, 岡崎圭一                                      |
| P-8  | 高成功率・高精度・高効率のQM用両端固定型遷移状態探索                                  | (分子科学研究所) ○甲田信一, 齊藤真司                                      |
| P-9  | Accelerated分子動力学法とAlphaFoldによるトランスポーター蛋白質の未解明構造探索            | (分子科学研究所 計算科学研究センター) ○大貫 隼, 岡崎圭一                           |
| P-10 | 金属ナノクラスターの光物性に関する理論研究  | (分子科学研究所) ○江原正博, 白男川貴史, Pei Zhao                           |

## 懇親会

日時 1月15日(月) 18:30~20:00

会場 岡崎コンファレンスセンター 中会議室

会費 4,000円(一般) / 2,000円(学生)

- ・予約制のため申込み後のキャンセルはご遠慮ください。
- ・急なキャンセルは、不参加でもお支払いいただく場合がございます。
- ・お支払いは受付時間に集金します、お釣りのないようお願いします。

### ■ ポスター発表

ポスターボードのサイズは、縦120cm×横90cmです。

### ■ 宿泊について

・三島ロッジに宿泊を希望される方は参加登録の際に申し込んで下さい(1泊2600円)。但しロッジは数に限りがあり、希望に添えない場合もございます。

宿泊施設をおとりした方には、後日、メールにて連絡します。

<http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/>

・ホテルはご自身で予約をお願い致します。近郊のホテル案内は下記URLをご参考ください。

<http://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

**\* ロッジの宿泊受付を終了しました。**

### ■ 旅費・宿泊費の支援について

- ・支援はセンター利用者優先で、予算に限りがあり、ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。
  - \*民間企業の方への旅費支援、及びロッジのご利用はご遠慮いただいております。
- ・学生の場合は修士以上で、指導教官の許可が得られる方のみ支援可能です。
  - \*学部生の参加は可能ですが旅費の支援はできません。
  - \*学生の方は賠償付傷害保険の加入が参加条件となります。
- ・自然科学研究機構の旅費規程に基づき、所属機関からの往復交通費、日当及び宿泊費を支給します。
  - \*前後に別用務で他機関にご出張される場合(発着地が所属機関ではない場合)はこの限りではありませんのでその旨を事前にお知らせ願います。(登録ページの「連絡事項」にご記入ください。)
  - 支援可能な方には、申込締切後、所定の手続き案内メールを差し上げます。
  - \*飛行機をご利用の場合は、その旨「連絡事項」にご記入ください。搭乗券半券往復原本・領収書・航空券明細の提出が必要です。(航空券明細及び領収書は事前に提出ください。)
  - 開催日と間隔のあく搭乗日の場合、支援の対象外となる場合があります。特別な事情のある方は事前にご連絡をお願いします。
- ・登録口座への振込はワークショップ終了後、1~2ヶ月後となります。

**\*旅費・宿泊費の支援の受付を終了しました。**

参加（旅費支援あり）申込締切日：2023年12月8日（金）\*申し込みを締め切りました。

参加（旅費支援なし）およびポスター発表の申込締切日：2023年12月25日（月）\*申し込みを締め切りました。

\*ポスター発表の申込みは、発表者リストと発表タイトルが登録時に必要です。

Zoomウェビナー参加（オンライン）申込締切日：2024年1月12日（金）正午まで（延長しました）\*申し込みを締め切りました。

\*申し込みを締め切りました。多数の登録ありがとうございました。

参加登録は以下のリンクよりお願いします

<https://registration.ims.ac.jp/scws2023/registration>

■ お問い合わせ

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

TEL: 0564-55-7462

FAX: 0564-55-7025

Email: rccs-scws2023\_at\_ims.ac.jp

\*メールアドレス内の\_at\_は@に直してお送りください。

\*このページ内の著作権はすべて分子科学研究所に属します。無断転載等はお断りいたします。