

## スーパーコンピュータワークショップ2008のご案内

### 大規模計算と分子のダイナミクス

日時	平成20年2月18日(月) 13:00 - 19日(火) 17:00頃
会場	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

当計算科学研究センターは、超高速な演算性能を誇る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。大規模な計算処理環境を駆使した分子科学の研究を目的に活用されており、特に電子状態理論や分子動力学法を中心として分子の構造、ダイナミクス、反応などの解明が進められる中で多くの研究成果が生まれています。そこで本ワークショップでは、当センターの計算資源を利用して得られた最新の研究成果の報告会を企画いたしました。昨年度から開始した超大規模利用の研究グループによる分子科学の新しい知見や今後の展望をご講演していただきます。新たな試みとしてポスター発表も計画しています。この会をお互いに情報交換しながら議論を深め合う場にしたいと思います。

また、センターの研究成果報告に加えて、この分野の最前線でご活躍されている研究者をお招きし最近の成果についてのご講演を計画しております。特に今回のワークショップでは、分子のダイナミクスを中心テーマに据えてプログラムを構成しました。ab initio MDや化学反応ダイナミクス、また分子動力学法や第一原理シミュレーションなどの方法論の発展と、それに伴い次々と解明される多様な分子のダイナミクスについての最新の知見をご講演、ご討論いただきたいと考えております。

さらに、次期導入予定のスーパーコンピュータに関する説明も行う予定です。センター利用者のみならず多くの方々のご参加を歓迎致します。

### 講演内容

- 特別講演  
木寺詔紀（横浜市立大学）  
高塚和夫（東京大学）  
山下晃一（東京大学）
- 招待講演  
安藤耕司（京都大学）  
石田干城（分子科学研究所）  
加藤 毅（東京大学）  
重田育照（筑波大学）  
安池智一（分子科学研究所）
- 施設利用S 研究成果報告  
北尾彰朗（東京大学）  
森下徹也（産業技術総合研究所）
- ポスター発表会
- 次期スーパーコンピュータ利用講習会

### プログラム

2月18日(月)

13:00-13:10	はじめに	中村宏樹(分子研所長)
13:10-13:50	施設利用S研究成果報告 「大規模分子動力学法による生体超分子の立体構造変化と機能」	北尾彰朗（東大）
13:50-14:30	施設利用S研究成果報告 「極限環境下で発現するシリコンの構造多様性」	森下徹也（産総研）
14:30-14:45	休憩	
14:45-15:45	特別講演 「タンパク質の分子動力学シミュレーションに基づいた研究」	木寺詔紀（横浜市大）
15:45-17:45	ポスター発表	
17:45-18:00	休憩	
18:00-20:00	懇親会	

2月19日(火)

9:00-10:30	次期スーパーコンピュータ利用講習会（日立製作所） 「HITACHI SR11000次世代モデル ご紹介」 「HITACHI SR11000次世代モデル プログラムチューニング」	
10:30-10:40	休憩	

10:40-11:40	特別講演 「分子の核波束と電子波束のダイナミクス」	高塚和夫（東大）
11:40-12:10	招待講演 「量子開放系としての表面吸着分子の局所電子状態」	安池智一（分子研）
12:10-13:30	昼食	
13:30-14:00	招待講演 「凝縮系における量子移動ダイナミクスの理論とシミュレーション」	安藤耕司（京大）
14:00-15:00	特別講演 「分子科学と表面科学における量子ダイナミクス」	山下晃一（東大）
15:00-15:20	休憩	
15:20-15:50	招待講演 「Theoretical Investigation of Time-Dependent Phenomena in Solution Systems」	石田干城（分子研）
15:50-16:20	招待講演 「多配置波動関数による強光子場中分子の電子ダイナミクスの記述」	加藤毅（東大）
16:20-16:50	招待講演 「大規模量子分子動力学のための基礎理論の開発：量子的キュミュラント動力学法」	重田育照（筑波）
16:50-17:00	おわりに	

- 参加費：無料(宿泊費・旅費の援助あり)
- 懇親会：2月18日（月） 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)

## ポスター発表について

ポスターボードのサイズは、縦120cm×横90cmです。

## 参加またはポスター発表申込方法

参加またはポスター発表の申し込みにつきましては、以下のフォームに記載して、電子メールで、計算科学研究センターワークショップ担当係(workshop@draco.ims.ac.jp)までお申し込みください。ただし、旅費を希望の参加およびポスター発表の申込締切日は、事務手続きの都合のため、2008年1月31日（木）とさせていただきます。  
(なお、今回はポスター発表の要旨をご提出して頂く必要はありません。)

## 申し込みフォーム

(1)氏名：

(2)所属機関名：

所属機関の住所：

連絡先e-mailと電話番号：

所属機関の最寄り駅：

(3)身分(学生の方は学年)：

(4)旅費の支給：希望する ・ 希望しない

\*学生の場合は修士以上のみ支給可能です。

\*旅費を支給する方には、別途銀行口座登録が必要となりますので、後に連絡します。

(5)旅費希望する場合は日程：2月 日・2月 日(泊 日)

ワークショップ前後の他の出張等の有 ・ 無

他の出張等が(有)の場合は、その日程・場所・旅費・日当の支給の有無をお知らせ下さい。

(6)宿泊：希望する ・ 希望しない

遠路の方、やむを得ない方のみ、前泊・後泊が認められています。

(7)飛行機利用：有 ・ 無

有の場合、領収書・座席番号等が記載された「搭乗券」を往復とも提出下さい。

チケットレスサービスで購入した場合は、「支払い完了のお知らせ」のご提出をお願いします。

(一式揃わないと振込みが遅くなりますのでご協力をお願いします。)

(8)懇親会: 2月18日(月) 参加する ・ 参加しない

(一般：4,000円、学生：2,000円)

[ポスター発表]

(I)ポスター発表：希望する ・ 希望しない

(以下ポスター発表希望者のみ)

(II)(センター利用者の場合)代表利用者：

(III)講演タイトル：

(IV)著者および所属(発表者に○印を付けて下さい)：

(例：○分子太郎(分子大)、原子次朗(電子大))

旅費希望の参加およびポスター発表の申込締切日：2008年1月31日(木)

## 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

E-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp)