

## スーパーコンピュータワークショップ2013のご案内

### 「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」

日時	平成 25年 1月22日(火) 14:00 ~ 23日(水)
会場	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
参加費	無料

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の皆様にも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「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」というテーマで様々な問題に精力的に取り組んでおられる研究者の方々に講師にお招きし、理論および計算科学の視点から今後取り組むべき問題と必要とされる方法論、そしてそれらを念頭においたこれからの可能性について広く展望し、ご議論いただくためのワークショップを企画しました。

さらに、昨年同様、実験研究者の方々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も企画しました。

参加希望者は、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。ただし旅費をご希望の方は、事務手続きの都合上、平成25年1月7日(月)までにお申し込みください。

### プログラム

#### 2013年1月22日(火)

- 14:00 - 14:10 始めに 齋藤 真司 (センター長)
- 14:10 - 14:50 常田 貴夫 (山梨大学)  
「軌道エネルギーに関する最新の研究」
- 14:50 - 15:30 山下 雄史 (東京大学)  
「分子動力学シミュレーションの創薬応用」
- 15:30 - 15:50 休憩
- 15:50 - 16:30 高野 宏 (慶応義塾大学)  
「生体高分子系の緩和モード解析」
- 16:30 - 17:10 尾形 修司 (名古屋工業大学)  
「オーダーN実空間DFT法を用いたハイブリッド量子古典シミュレーション」
- 17:10 - 18:20 ポスター発表
- 18:30 - 20:30 懇親会 (於 職員会館) 会費: 一般5000円、学生4000円

#### 2013年1月23日(水)

- 9:30 - 10:10 上羽 牧夫 (名古屋大学)  
「結晶表面における原子ステップのパターン形成」
- 10:10 - 10:50 藤堂 真治 (東京大学)  
「大規模並列量子モンテカルロ法ALPS/looperと量子磁性体への応用」
- 10:50 - 11:10 休憩
- 11:10 - 11:50 大谷 実 (産業技術総合研究所)  
「電極/溶液界面における電気化学反応シミュレーション: 理論の発展と最近の展開」
- 11:50 - 12:30 佐藤 健 (東京大学)  
「強レーザー場中の多電子ダイナミクス: 多配置波動関数理論の開発と応用」
- 12:30 - 12:40 おわりに

#### 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) :
  - \* ロッジ (素泊まり) は部屋に限りがあり、ご希望に添えない場合がございます。
  - \* 料金は前払いのため、開始後30分以内にお釣りの無いようにお支払いをお願いします。
    - \* チェックイン午後3時、チェックアウト午前9時
  - \* ホテルをご希望の方は各自でご予約をお願いします。下記URLをご参考ください。  
<http://www.ims.ac.jp/location/hotel.html>

• **旅費・宿泊費のサポートについて：**

- \* 学生の場合は修士以上で、指導教員の許可（印）が得られる方のみサポート可能です。
- \* 旅費・宿泊費をサポートするには、銀行口座登録が必要となりますので、ワークショップ事務局(e-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp))までご連絡ください。
- \* ワークショップ前後の他の出張等がある場合は、その日程・場所・旅費・日当の支給の有無をお知らせ下さい。
- \* 旅費割り当ては、センター利用グループを優先させていただきます。
- \* ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。

\* 学術支援以外の旅費の支給はご遠慮いただいております。

\* 学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

旅費希望の参加の申込締切日：2013年1月7日（月） 17：00 **申し込みは締め切りました。**

[登録はこちら](#)

参加およびポスター発表の申込締切日：2013年1月14日（月） 17：00

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)