

「様々な対象に応用される計算分子科学」

スーパーコンピュータワークショップ2015のご案内

「スーパーコンピュータワークショップ2015」は終了いたしました。  
多数のご参加をいただき、ありがとうございました。

「様々な対象に応用される計算分子科学」

日時 平成 27年 1月29日(木) 14:00 ~ 30日(金)12:40

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に共同利用して頂いています。こ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、生物科学といった様々な分野の研究に活用されています。

また、当センターでは例年最先端の計算分子科学とその発展を理解し新しい展開を計ることを目的としてワークショップを開催しております。今年度は、計算分子科学を様々な対象に応用するためにどのような手法・アイデアがあるのかということに焦点を当てるために、「様々な対象に応用される計算分子科学」というテーマでワークショップを企画しました。

本ワークショップでは、計算分子科学分野を中心に様々な分野でご活躍されている研究者の方々に講師にお招きし、各分野における新たな取り組み、及び最新の成果と展望をご紹介します。

また、実験研究者の方々や大学院生の皆さんに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。

1月29日(木)

13:30 - 14:00 受付

14:00 - 14:10 はじめに

14:10 - 14:50 北尾彰朗(東京大学) 高度な分子動力学によるタンパク質の機能シミュレーション

14:50 - 15:30 森下徹也(産業技術総合研究所) 対数平均カダイナミクスによる反応座標サンプリングと自由エネルギー計算

15:30 - 15:50 Break

15:50 - 16:30 天能精一郎(神戸大学・分子研) 超並列計算環境によるF12電子状態理論の最近の発展

16:30 - 17:10 奥村久士(分子科学研究所) アミロイド線維の形成初期過程と破壊の分子動力学シミュレーション

17:10 - 17:50 ポスター発表

18:00 - 20:00 懇親会

1月30日(金)

9:30 - 10:10 森田明弘(東北大学) 溶液界面の分子シミュレーション研究

10:10 - 10:50 墨智成(岡山大学) 実験と理論の連携による生命科学へのアプローチ

10:50 - 11:10 Break

11:10 - 11:50 森川良忠(大阪大学) 第一原理シミュレーションと統計力学手法を組み合わせた触媒反応解析

11:50 - 12:30 長岡正隆(名古屋大学) 複合化学反応シミュレーションによる立体・構造の制御に向けて

12:30 - 12:40 おわりに

プログラムは都合により変更する場合があります。

懇親会

1月29日(木)

懇親会会場 岡崎コンファレンスセンター

懇親会会費 4,000円(一般) / 3,000円(学生)

\* 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

・ご自身で予約をお願い致します。

下記URLをご参考ください。

<http://www.ims.ac.jp/location/hotel.html>

\* 旅費・宿泊費の支援について:

・旅費・宿泊費を支援する方には、後日手続きに関するメールをさしあげます。

自然科学研究機構より、登録いただいた口座に1, 2ヶ月後振込となります。

- ・ 学生の場合は修士以上で、指導教官の許可（印）が得られる方のみ支援可能です。  
学部生の参加はできませんが、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です。
- ・ 支援はセンター利用者優先で、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、及びロッジのご利用はご遠慮いただいております。☆

\* 懇親会について

- ・ 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。

**旅費希望締め切りました。**

旅費希望の参加の申込締切日： 2015年1月16日（金） 17:00

**登録申し込み締め切りました。**

参加申込締切日： 2015年1月21日（水） 17:00

**参加申し込み締め切りました。**

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)