

## スーパーコンピュータワークショップFY2015のご案内

自然科学研究機構計算科学研究センター  
スーパーコンピュータワークショップのご案内

“複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学”

日時 : 平成27年9月7日(月)、8日(火)

会場 : 岡崎コンファレンスセンター

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、分子・物性・生物科学などの広範な分野における様々な研究対象に存在する複雑系(システム)の問題へと取り組む際にどのような計算分子科学的手法・アイデアが必要とされるのかということに焦点を当てるために、“複雑な問題を対象とし、挑戦する計算分子科学”というテーマでワークショップを企画しました。

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27年8月21日(金)までにお申し込みください。

参加登録はこちら <https://registration.ims.ac.jp/scwsFY2015/registration>

また今年度は本ワークショップに引き続いて平成27年9月9 - 11日に分子シミュレーションプログラムNAMDの講習会が岡崎コンファレンスセンターにて開催されます。本ワークショップと併せて参加される方には旅費(自然科学研究機構規定額)の支給をいたします。詳細については下記 (<https://registration.ims.ac.jp/mdworkshop2015/>) をご覧ください。

### スーパーコンピュータワークショップFY 2015講演プログラム

“複雑な研究対象へと挑戦する計算分子科学”

2015年9月7日(月)

14:00 - 14:10 始めに

14:10 - 14:50 藤谷秀章(東京大学先端研)

「Molecular dynamics simulations for pharmaceutical target proteins」

14:50 - 15:30 寺田智樹(名古屋大学)

「ミオシンのバイアスブラウン運動を自由エネルギーランドスケープから考える」

15:30 - 15:50 休憩

15:50 - 16:30 上田一義(横浜国立大学)

「セルロース系分子の構造と物性に関する分子シミュレーション」

16:30 - 17:10 甲賀研一郎(岡山大学)

「均一および不均一溶液における疎水効果」

17:10 - 17:50 ポスター発表

18:00 - 20:00 懇親会 岡崎コンファレンスセンター

2015年9月8日(火)

10:00 - 10:40 武次徹也(北海道大学)

「光励起反応のポテンシャル曲面とダイナミクス」

10:40 - 11:20 岡本祐幸(名古屋大学)

「古典系および量子系の拡張アンサンブルシミュレーション」

11:20 - 13:00 昼食

13:00 - 13:40 諸熊奎治 (京都大学)  
「複雑分子系の化学反応の計算化学」

13:40 - 14:20 池口満徳 (横浜市立大学)  
「回転分子モーターF1-ATPaseの分子シミュレーション」

14:20 - 15:00 江原正博 (分子科学研究所)  
「不均一系触媒の理論計算科学」

15:00 - 15:10 おわりに

**懇親会:**

9月7日 (月曜)

会場 岡崎コンファレンスセンター 会費 4000円(一般)/3000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:** (ホテル・ロッジともに近距離の方の宿泊はできません。)  
\* ホテルをご希望の方はご自身で予約をお願いします。宿泊の証明が必要です。宿泊証明等(領収書)のご提出をお願いいたします。ホテルの案内はこのURLにございます。 <http://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>
- \* ロッジ代は初日の受付時間内にお支払可能な方で、到着の遅れる方はご利用いただけません。室数限定。宿泊証明不要です。
- **旅費の支給について:**
  - \* 自然科学研究機構より規定額の支給をいたします。\* 学生の場合は修士以上で、指導教員の許可(印)が得られる方のみ可能です。
  - \* ワークショップ事務局(e-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp))より手続きのメールをさしあげます。
  - \* 旅費支給は、センター利用の方を優先し、ご希望に添えない場合もございます。

<重要> NAMD講習会(9月9 - 11日) 参加者への旅費支給の情報

旅費支給に関して: NAMD講習会 (<https://registration.ims.ac.jp/mdworkshop2015/>) に参加される方で計算センターのスーパーコンピュータワークショップと併せて参加される方に支給をいたします。ご希望に添えない場合もございます。

- \* 学術支援以外の旅費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。 **参加申込み終了**

旅費希望の参加の申込締切日: 2015年8月21日(金) 12:00  
参加およびポスター発表の申込締切日: 2015年8月27日(木) 17:00

[登録申し込みはこちら](#)

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)