

## スーパーコンピュータワークショップ2010のご案内

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方々に共同利用していただいております。この超高速かつ大規模な計算環境は、分子科学、物性科学、生物科学の研究に活用されており、分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。理論計算は実験においても反応の解析や物性などの研究に広く利用されるようになりました。これらの観点から、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たワークショップを企画しました。

### 「大規模並列分子シミュレーションの最前線」

日時	平成 22年 1月13日(水) 13:30 ~ 14日(木) 17:00
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

#### • プログラム (ポスター発表を含む)

本ワークショップでは、「大規模並列分子シミュレーション」とその周辺領域における研究の進展について議論することを目的としました。計算分子科学の最前線で活躍されている方々をお招きして、理論の新しい展開について紹介していただくと同時に、超並列計算への取り組みについてご紹介いただきます。背景や理論・方法に重点をおいて解説していただき、それぞれの分野における将来について展望していただきます。

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。

**幅広い分野からのご参加を期待しております。**

### プログラム

1月13日(水)

13:30 - 13:40	はじめに 中村宏樹(分子研所長)
13:40 - 14:20	池口満徳(横浜市大) 「DNA結合タンパク質の機能ダイナミクス」
14:20 - 15:00	北尾彰朗(東大) 「大規模分子動力学によるバイオナノマシンの機能シミュレーション」
15:00 - 15:20	Break
15:20 - 16:00	佐藤啓文(京大) 「溶液の理論化学：水溶液、イオン液体、蛋白質」
16:00 - 16:40	宮田竜彦(分子研) 「MD/3D-RISM連成計算法の開発と応用」
16:40 - 17:20	山本武志(京大) 「QM/MM法を用いた化学反応の自由エネルギー計算と反応経路の探索」
17:20 - 18:30	ポスター発表
18:30 - 20:30	懇親会

1月14日(木)

9:00 - 9:40	佐藤三久(筑波大) 「次世代スパコンに向けた計算機科学と計算科学の連携にむけて - e-サイエンスプロジェクトとナノ拠点での連携から -」
9:40 - 10:20	町田昌彦(原研) 「行列対角化と密度行列繰りこみ群の超並列化：強相関非平衡量子多体系の理解へ向けて」
10:20 - 10:40	Break
10:40 - 11:20	伊藤伸泰(東大) 「計算機シミュレーションによる非平衡状態の研究」
11:20 - 12:00	松本充弘(京大) 「固体熱伝導解析 —フォノン工学のためのDSMC法コードの開発—」
12:00 - 13:30	昼食
13:30 - 14:10	森田明弘(東北大) 「界面非線形分光の分子シミュレーション計算手法の開発」
14:10 - 14:50	常行真司(東大) 「波動関数理論にもとづく凝縮系の電子状態計算」

14:50 - 15:30	山本量一 (京大) 「ソフトマターのマルチスケールシミュレーション」
15:30 - 15:50	Break
15:50 - 16:10	有田俊雄 (NVIDIAジャパン) 「GPUコンピューティングの現在と未来」
16:10 - 16:50	田村陽介 (フィックスターズ) 「CUDAによるプログラム手法と応用事例」
16:50 - 17:00	おわりに 奥村久士 (計算センター)

**懇親会：**

1月13日(水) 岡崎コンファレンスセンター 中会議室  
懇親会会費 5,000円(一般)/4,000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 (三島ロッジ)：**  
\*ロッジ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。  
\*三島ロッジ以外の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。  
\*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。

参加登録はこちらです -> [終了しました](#)

旅費希望の参加およびポスター発表の申込締切日：~~2009年12月18日(金)~~ -> 2010年1月3日(日) <延長しました>

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)

■ 過去の開催

2008(平成20)年度	<a href="#">第9回公開講演プログラム</a>	
2007(平成19)年度	<a href="#">第8回公開講演プログラム</a>	
2006(平成18)年度	<a href="#">第7回公開講演プログラム</a>	
2005(平成17)年度	<a href="#">第6回公開講演プログラム</a>	
2004(平成16)年度	<a href="#">第5回公開講演プログラム</a>	
2003(平成15)年度	<a href="#">第4回公開講演プログラム</a>	
2002(平成14)年度	<a href="#">第3回公開講演プログラム</a>	
2001(平成13)年度	<a href="#">第2回公開講演プログラム</a>	
2000(平成12)年度	<a href="#">第1回公開講演プログラム</a>	
1999(平成11)年度	<a href="#">第16回公開講演会</a>	
1998(平成10)年度	<a href="#">第15回公開講演会</a>	
1997(平成9)年度	<a href="#">第14回公開講演会</a>	
1996(平成8)年度	<a href="#">第13回公開講演会</a>	

1995(平成7)年度	<a href="#">スーパーコンピュータワークショップ</a>	
1994(平成6)年度	<a href="#">スーパーコンピュータワークショップ (第12回公開講演会)</a>	
1993(平成5)年度	<a href="#">スーパーコンピュータワークショップ'94</a>	第13回大型計算成果発表会
1992(平成4)年度		第12回大型計算成果発表会
1991(平成3)年度	<a href="#">第11回公開講演会</a>	第11回大型計算成果発表会
1990(平成2)年度	<a href="#">第10回公開講演会</a>	第10回大型計算成果発表会
1989(平成元)年度		第9回大型計算成果発表会
1988(昭和63)年度	<a href="#">第9回公開講演会</a>	第8回大型計算成果発表会
1987(昭和62)年度	<a href="#">第8回公開講演会</a>	第7回大型計算成果発表会
1986(昭和61)年度	<a href="#">第7回公開講演会</a>	第6回大型計算成果発表会
1985(昭和60)年度	<a href="#">第6回公開講演会</a>	第5回大型計算成果発表会
1984(昭和59)年度	<a href="#">第5回公開講演会</a> <a href="#">第4回公開講演会</a>	第4回大型計算成果発表会
1983(昭和58)年度	<a href="#">第3回公開講演会</a> <a href="#">第2回公開講演会</a>	
1982(昭和57)年度	<a href="#">第1回公開講演会</a>	第3回大型計算成果発表会
1981(昭和56)年度		第2回大型計算成果発表会
1980(昭和55)年度		第1回大型計算成果発表会

添付	サイズ
<a href="#">2010WS.pdf</a>	515.09 KB