

## 「第2回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～」

分子科学研究所主催による第2回分子シミュレーションスクールを下記の要領で開催いたします。このスクールは、分子シミュレーション全体を展望できる広い範囲を、充実した講師陣のもとで4日間じっくりと学んでいただける本格的な講習会です。講義は学部卒業程度の知識があれば理解できるような内容となっており、特にシミュレーションの経験や専門知識は前提としていません。これから分子シミュレーションを始めようとしておられる学部学生や大学院生、または実験家や企業の研究者など、計算科学に興味のある方々のご参加をお待ちしております。

- 主催：分子科学研究所
- 共催：分子シミュレーション研究会
- 会場：岡崎コンファレンスセンター 小会議室 (<http://www.orion.ac.jp/occ/>)
- 会期：2008年12月22日(月)から12月25日(木)
- 参加費：無料
- 懇親会：12月23日(火) 18:30 から 岡崎コンファレンスセンター中会議室
- 会費：5000円(一般)/4000円(学生)

## ■ 講演プログラム

12月22日(月)

09:30-10:20	受付
10:20-10:30	開会式
10:30-12:00	樋渡保秋先生(豊田理研)「分子シミュレーション入門(誕生と生い立ち)」
13:30-15:00	上田 顕先生(京都大学)「分子シミュレーションの基礎」
15:00-16:30	三上益弘先生(産業技術総合研究所)「原子間・分子間相互作用のポテンシャル関数」
18:00-19:30	杉田有治先生(理化学研究所)「生体系の分子シミュレーション」ポスター発表
19:30-21:00	成見 哲先生(慶應義塾大学)「グラフィックカードやPLAYSTATION3を使った分子動力学シミュレーションの高速化」

12月23日(火)

9:00-10:30	森下徹也先生(産業技術総合研究所)「分子動力学計算における温度・圧力制御手法」
10:30-12:00	岡崎 進先生(名古屋大学)「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」
13:30-15:00	姫野龍太郎先生(理化学研究所)「スーパーコンピュータによる高速計算と次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト」
15:00-16:30	斎藤貴之先生(国立天文台)「粒子シミュレーションによる銀河形成研究」
16:30-18:00	吉井範行先生(姫路独協大学)「ミセルのMDシミュレーション」
18:30-21:00	懇親会

12月24日(水)

9:00-10:30	小田竜樹先生(金沢大学)「第一原理分子動力学シミュレーションの基礎と応用」
10:30-12:00	長岡正隆先生(名古屋大学)「化学反応と分子シミュレーション」
13:30-15:00	篠田 渉先生(産業技術総合研究所)「粗視化分子シミュレーション」
15:00-16:30	兵頭志明先生(豊田中央研究所)「階層的な材料シミュレーションと粗視化の方法? 実用材料における使用環境を考慮した分子シミュレーションに向けて?」
17:00-19:00	ディスカッション「分子シミュレーションの将来展望? 10年後に何ができ、何が必要か??」

12月25日(木)

9:00-10:30	志賀基之先生(日本原子力研究所)「経路積分分子動力学法」
10:30-12:00	堀内利得先生(核融合科学研究所)「プラズマの粒子シミュレーション」
13:30-15:00	北村一泰先生(大正製薬)「創薬における分子シミュレーション 現在&近未来」
15:00-16:30	礪部雅晴先生(名古屋工業大学)「非平衡統計物理学と分子シミュレーション」

- ホテルについて  
各自で予約して下さい。

(参考)東岡崎駅周辺のホテル

● 参加申込方法

下の申込用フォームを利用して電子メールで、  
[school@draco.ims.ac.jp](mailto:school@draco.ims.ac.jp) (分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域秘書 上野晴美)にお申し込みください。  
部分参加も可能ですが、学習効果の観点からは全期間の参加を推奨します。

● 定員

100名

● 申し込み締切

定員に達し次第締め切ります

● 旅費の援助およびロジジ宿泊

希望者の中から学生に対して旅費(往復交通費のみ支給(日当・宿泊費は支給されません))の援助およびロジジ宿泊の提供(一泊2,400円)を行います。予算枠とロジジの部屋数に限りがございますので、ご希望に添えない場合がありますのでご了承ください。結果については後日メールでお知らせします。

## 第2回分子シミュレーションスクール 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:

(3)身分(学生の方は学年):

(4)参加日程: 12月 日 から 12月 日

(5)懇親会: 12月23日(火) 参加する ・ 参加しない

(一般: 5,000円、学生: 4,000円)

(6)ロジジ宿泊: 希望する ・ 希望しない

\*学生優先。数に限りがありご希望に添えない場合があります。

\*ロジジ予約を希望されない方、ご希望に添えなかった方は各々でご予約ください

\*学部生及び大学院生限定

1.旅費支給: 希望する ・ 希望しない

\*往復交通費のみ支給(日当・宿泊費は支給されません)

\*予算に限りがございますのでご希望に添えない場合があります。

問い合わせ先: 山田篤志(名古屋大学) E-mail: [ayamada@apchem.nagoya-u.ac.jp](mailto:ayamada@apchem.nagoya-u.ac.jp)

ホームページ: <http://ccinfo2013.ims.ac.jp/msschool/prog08.html>

## 開催時の様子

開催時の写真を公開しています。 <http://ccinfo2013.ims.ac.jp/msschool/photo2008.html>