

「第12回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」「ポスト「京」重点課題5 オータムカレッジ - 分子シミュレーション -」「計算物質科学人材育成コンソーシアム 分子シミュレーションスクール」

「第12回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」  
「ポスト「京」重点課題5 オータムカレッジ - 分子シミュレーション -」  
「計算物質科学人材育成コンソーシアム 分子シミュレーションスクール」

2018年9月3日から6日までの日程で自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにおいて、分子科学研究所、ポスト「京」重点課題5、計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）、分子シミュレーション研究会の主催で「分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで -」を開催いたします。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、計算科学に興味がある方々のご参加をお待ちしております。

世話人 名古屋大学 吉井範行、分子科学研究所 岡崎圭一

主催：自然科学研究機構分子科学研究所、ポスト「京」重点課題5、計算物質科学人材育成コンソーシアム（分子科学）、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 <http://www.orion.ac.jp/occ/>

会期：2018年9月3日（月）～9月6日（木）

定員：100名

参加費：無料

申込締切：2018年8月3日（金）**\*WEBでの参加登録は終了しました**

**当日参加について**

当日参加もお受けいたします。直接会場にお越し下さい。

ただし、テキスト冊子の部数に限りがございます。冊子にてお渡しできない場合もございますので、あらかじめご了承ください。

なお、冊子をお渡しできない場合、テキストをダウンロードしていただくことは可能です。PC等ご用意ください。

また、本スクールは4日間通して受講いただくことを推奨しております。

ぜひ、ご参加いただけますようよろしくお願い致します。

**プログラム**

\*都合により変更になる場合もございます。スケジュールの都合上、応用研究の講義が基礎的な内容の講義より先になっている所がございますのでご了承ください。

\*スムーズな理解のために、事前に公開するテキストを用いて予習していただくことをお勧めします。

**第1日目：2018年9月3日（月）**

**\*敬称略**

|             |                                  |
|-------------|----------------------------------|
| 12:30-13:15 | 受付                               |
| 13:15-13:30 | 開会式                              |
| 13:30-15:00 | 松本充弘(京都大学)「シミュレーションの全体像・概論」      |
| 15:10-16:40 | 吉井範行(名古屋大学)「力学、解析力学、数値解法、拘束動力学」  |
| 16:50-18:20 | 奥村久士(生命創成探究センター)「各種統計アンサンブルの生成法」 |

**第2日目：2018年9月4日（火）**

|             |  |
|-------------|--|
| 9:00-10:30  | 三上益弘(慶應義塾大学)「原子間・分子間相互作用エネルギー関数と長距離力計算法」 |
| 10:40-12:10 | 甲賀研一郎(岡山大学)「統計力学」                        |
| 12:10-13:30 | 昼食                                       |
| 13:30-15:00 | 森田明弘(東北大学)「コンピューター・シミュレーションと理論化学」        |
| 15:10-16:40 | 篠田渉(名古屋大学)「階層的分子モデリング-粗視化の方法について-        |
| 16:50-18:20 | 松林伸幸(大阪大学)「自由エネルギー計算」                    |
| 18:30-18:50 | 樋渡保秋(金沢大学)「コンピュータ・レジェンド：三博士の紹介」          |
| 19:00-20:30 | 懇親会                                      |

**第3日目：2018年9月5日（水）**

|            |                              |
|------------|------------------------------|
| 9:00-10:30 | 長岡正隆(名古屋大学)「化学反応と分子シミュレーション」 |
|------------|------------------------------|

|             |   |
|-------------|---|
| 10:40-12:10 | 岡崎圭一（分子科学研究所）「反応速度論とマルコフモデル」                      |
| 12:10-13:30 | 昼 食   |
| 13:30-15:00 | 高田彰二（京都大学）「機械学習と分子シミュレーション」                       |
| 15:10-16:40 | 杉井泰介（株式会社日立製作所）「企業における材料系事例を中心とした分子シミュレーションの取り組み」 |
| 16:50-18:20 | 藤崎弘士（日本医科大学）「生体分子の構造変化経路サンプリング」                   |

#### 第4日目：2018年9月6日（木）

|             |   |
|-------------|---|
| 9:00-10:30  | 伊藤篤史（核融合科学研究所）「プラズマ-物質相互作用のシミュレーション」    |
| 10:40-12:10 | 芝 隼人（東北大学）「ガラス動力学のシミュレーション — モデル・計算・解析」 |
| 12:15-12:30 | 閉会式・修了書授与                               |

#### ■宿泊について

\*近郊ホテルの案内は、下記にございます。ホテル宿泊はご自身で予約をお願いします。  
近郊ホテルのURL <https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

\*三島ロッジ（1泊2500円）をご利用いただけます。希望される方は参加申し込のロッジ希望に申し込んで下さい。  
数に限りがあるため学生限定で先着順となります。宿泊が必要な遠方の方を優先しますので、近郊の方はご遠慮願います。  
申し込みから1週間以内に宿泊の可否をメールにて連絡致します。

ロッジのURL <http://www.orion.ac.jp/lodge>

※申し込みが予定数を越えたためロッジの宿泊受付を終了します。申し訳ございません

#### ■交通費のサポートについて

\*学生限定(学部生も可。予算と人数に限りがあり先着順となります。ご希望にそえない場合もございます。)

\*往復交通費(自然科学研究機構規定額)を支給します。

\*所定の手続きの案内メールを差し上げます、約二か月後、口座振り込みとなります。

※予算に達したため交通費のサポート受付は終了致しました（2018.7.6）

■学生の方は、賠償付傷害保険（物を壊したら保証がある保険）の加入が参加の条件です。

■参加ご希望の方は8月3日（金）までに下記からご登録ください。 ※WEBでの参加登録は終了しました

<https://registration.ims.ac.jp/mss2018/registration>

#### ■分子シミュレーションスクールおよびホームページに関する 問い合わせ先:

自然科学研究機構 分子科学研究所  
分子シミュレーションスクール事務局

〒444-8585 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: [school\\_at\\_draco.ims.ac.jp](mailto:school_at_draco.ims.ac.jp)

※メールアドレス内の「\_at\_」は「@」に直してお送り下さい。

\*このページ内の著作権はすべて分子科学研究所に属します。

無断転載等は一切お断りいたします。

■当日の集合写真はこちらからダウンロードできます。

<https://ccportal.ims.ac.jp/msschool/photo2018>