

## 「第13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13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」

2019年9月2日から5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」

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学会

会場: 岡崎コンファレンスセンター <http://www.orion.ac.jp/occ/>

会期: 2019年9月2日（月）～9月5日（木）

定員: 120名

参加費: 無料

懇親会: 9月3日（火）18:15～19:45 岡崎コンファレンスセンターにて行います。

懇親会費: (一般) 4,000円 / (学生) 3,000円

懇親会は予約制のためキャンセルはご遠慮下さい。不参加でもお支払いただく場合がございます。

初日の受付時に集金いたします。お釣りのないようにお願いいたします。

申込締切: 8月2日（金）まで

### プログラム

第1日目: 2019年9月2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」  |
| 17:00-18:30 | 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: 2019年9月3日（火）

|             |  |
|-------------|--|
| 9:00-10:30  | 甲賀研一郎 (岡山大学) 「統計力学」                        |
| 10:40-12:10 | 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」 |
| 12:10-13:30 | 昼食   |
| 13:30-14:30 | 森田明弘 (東北大) 「分子シミュレーションと理論化学」               |

|             |                                |
|-------------|--------------------------------|
| 14:40-15:40 | 長岡正隆 (名古屋大学) 「化学反応と分子シミュレーション」 |
| 16:00-17:30 | 松林伸幸 (大阪大学) 「自由エネルギー計算」        |
| 17:40-18:00 | 樋渡保秋 (金沢大学) 「コンピュータ・レジェンド」     |
| 18:15-19:45 | 懇親会                            |

第3日目：2019年9月4日（水）

|             |  |
|-------------|--|
| 9:00-10:00  | 岡崎圭一 (分子科学研究所) 「反応速度論とマルコフモデル」                   |
| 10:10-11:10 | 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-」            |
| 11:20-12:20 | 高田彰二 (京都大学) 「機械学習と分子シミュレーション」                    |
| 12:20-13:40 | 昼 食  |
| 13:40-14:40 | 杉井泰介 (株式会社日立製作所) 「分子シミュレーションの活用～企業における取り組み方と事例～」 |
| 14:50-15:50 | 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」                |
| 16:10-17:10 | 志賀基之 (日本原子力研究開発機構) 「自由エネルギー計算手法・アラカルト」           |
| 17:20-18:20 | 芝 隼人 (東北大学) 「ガラス動力学のシミュレーション－基本手法と最近の発展」         |

第4日目：2019年9月5日（木）

|             |   |
|-------------|---|
| 9:00-10:00  | 安藤嘉倫 (名古屋大学) 「分子シミュレーションの高速・並列化－最近の進展－」 |
| 10:10-11:10 | 三浦伸一 (金沢大学) 「経路積分分子動力学法」                |
| 11:20-12:20 | 畠山多加志 (名古屋大学) 「高分子の粗視化分子シミュレーション」       |
| 12:20-12:35 | 閉会式・修了書授与                               |

\*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しまっている場合があります。

スムーズな理解のために、事前に公開いたしますテキストを用いて予習していただくことをお勧めいたします。

#### ■宿泊について

\*三島ロッジ（1泊2500円）をご利用いただけます（学生限定）。希望される方は参加登録のロッジ希望に申し込んで下さい。

\*お申込みから1週間以内に宿泊の可否をメールにて連絡します。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下さい。

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

※ロッジ宿泊の申し込みが予定数を超えたので、宿泊受付は終了いたしました。

\*近郊ホテルの案内は、下記にございます。ホテルにご宿泊の場合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>

### ■交通費のサポートについて

\*学生限定(学部生も可。予算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)のみ支給します(宿泊代は支給しませんのでご了承ください)

\*飛行機利用の場合、領収書、航空券明細、搭乗券(搭乗証明書)の提出が必要です。開催日より離れて搭乗日がある場合は

※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

### ■参加登録

参加ご希望の方は8月2日(金)までに、下記からご登録ください。

\*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。

※参加登録の受付は終了致しました

### ■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

※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。