

## 「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」

開催日: 2022年1月11日(火)~12日(水)

開催方法: Zoom によるオンライン開催

参加費: 無料

定員: 300名

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、「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」というテーマで理論・計算科学研究に取り組んでおられる方々を講師にお招きし、最新の成果、これからの可能性や展望をご紹介いただくためのワークショップを企画しました。さらに、多くの方に幅広く参加していただけるようポスター発表と、NVIDIA より講師をお招きして OpenACC による GPU プログラミングの講習会を行います。

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入力の上、お申し込みください。

\* 参加のための必要情報 (Zoom ID、PW情報等) はメールにてご連絡いたします。

\* OpenACC では Fortran や C++ 等のコードにディレクティブを追加する形で比較的容易に GPU を利用することができます。

## プログラム (\*敬称略)

## 1日目 2022年1月11日(火)

|                    |                |                               |
|--------------------|----------------|-------------------------------|
| 13:00-13:10        |                | はじめに 所長挨拶                     |
| セッション1 (座長: 伊藤 暁)  |                |                               |
| 13:10-13:50        | 古賀信康 (ExCELLS) | 「整合性原理と新規タンパク質デザイン」           |
| 13:50-14:30        | 黒田大祐 (東京大学)    | 「抗体設計に関する分子シミュレーション研究」        |
| 14:30-15:10        | 高田彰二 (京都大学)    | 「ATP合成酵素の分子シミュレーション研究」        |
|                    | 休憩             |                               |
| セッション2 (座長: 岩橋 建輔) |                |                               |
| 15:20-16:20        | 丹愛彦 (NVIDIA)   | 「OpenACC講習会」                  |
|                    | 休憩             |                               |
| 16:30-17:50        | ポスター発表         | (Zoom ブレイクアウトルームを用いた個別プレゼン形式) |

## 2日目 2022年1月12日(水)

|                    |                |   |
|--------------------|----------------|---|
| セッション3 (座長: 甲田 信一) |                |   |
| 09:30-10:10        | 篠田渉 (岡山大学)     | 「生体高分子自己集合系の分子シミュレーション」                           |
| 10:10-10:50        | 奥村久士 (ExCELLS) | 「新型コロナウイルスの増殖とアルツハイマー病の発症に関するタンパク質の分子動力学シミュレーション」 |
| 10:50-11:30        | 野口博司 (東京大学)    | 「生体膜のダイナミクス: 反応拡散波と膜変形のカップリング、非平衡ゆらぎ」             |
|                    | 休憩             |   |
| セッション4 (座長: 小杉 貴洋) |                |   |
| 13:00-13:40        | 林重彦 (京都大学)     | 「分子シミュレーションによるタンパク質分子機能活性化の理論的解明」                 |
| 13:40-14:20        | 古田忠臣 (東京工業大学)  | 「分子シミュレーションで探る膜トランスポーターの構造ダイナミクス」                 |
| 14:20-14:30        |                | おわりに  |

|  |  |  |
|--|--|--|
|  |  |  |
|--|--|--|

## ポスター発表

|      |   |                                      |
|------|---|--------------------------------------|
| P-1  | 超音波キャビテーションの分子動力学シミュレーション                               | ○浅野 優太(東大物性研), 渡辺 宙志, 野口 博司          |
| P-2  | Rasタンパク質系におけるGTP加水分解効果の理論的検証                            | ○栗崎 以久男(神戸大), 田中 成典                  |
| P-3  | 分子動力学シミュレーションによるSARS-CoV及びSARS-CoV-2のRNA依存性RNAポリメラーゼの比較 | ○伊藤 暁(分子研), 谷本 勝一, 奥村 久士             |
| P-4  | 時計タンパク質KaiB-KaiC複合体形成における多量体性の役割                        | ○甲田 信一(分子研), 齊藤 真司                   |
| P-5  | 自由エネルギー計算による翻訳開始段階におけるリボソームとtRNAの相互作用解析                 | ○森 義治(神戸大), 田中 成典                    |
| P-6  | 分子シミュレーションによるヘリオロドプシンの亜鉛結合に関する研究                        | ○宮川 晃一(筑波大), 庄司 光男, 重田 育照            |
| P-7  | アミノ酸シッフ塩基銅錯体-リゾチーム複合体のドッキングシミュレーションと構造予測                | ○滝口 裕司(東京理科大)                        |
| P-8  | シアノバクテリアAnabaena PCC7119 フェレドキシンに対する分子動力学計算             | ○仲吉 朝希(広島大), 鷹野 優                    |
| P-9  | $\pi$ -アルキル発光性分子液体の励起エネルギー移動モデリング                       | ○山本 裕生(京都大), Lu Fengniu, 中西 尚志, 林 重彦 |
| P-10 | New Theoretical Chemistry Models and Problems           | ○張 福鍊(Chang Medical Services)        |

**参加登録は以下のリンクよりお願いします**

<https://registration.ims.ac.jp/scws2021/registration>

### ■ ポスター発表

Zoom ブレイクアウトルームを用いた個別プレゼン形式で行います。  
ポスター発表では分子科学の幅広い研究分野からの発表を期待しています。

### ■ 参加申込締切(ポスター発表有り)

**2022年1月6日(木) 24:00**

発表者リストと発表タイトルが登録時に必要です。

### ■ 参加申込締切(ポスター発表無し)

随時受けつけておりますが、余裕を持ってご登録ください。

### ■ 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

Email: rccs-scws2021\_at\_ims.ac.jp

\*メールアドレス内の\_at\_は@に直してお送りください。

\*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。無断転載等はお断りいたします。