

「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。