

「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 | π -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。