

## 「第3回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～」

### 第5回分子・物質シミュレーション中核拠点形成事業人材育成講座 「第3回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～」

分子科学研究所主催による第5回分子・物質シミュレーション中核拠点形成事業人材育成講座を下記の要領で開催いたします。今回の分子シミュレーションスクールは、分子シミュレーション全体を展望できる広い範囲を充実した講師陣のもとで、4日間じっくり学んでいただける本格的な講習会です。

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。

主催：分子科学研究所

共催：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 小会議室  
> <http://www.orion.ac.jp/occ/>

会期：2009年12月15日（火）～12月18日（金）

参加費：無料

懇親会：12月16日（水）18：30～

岡崎コンファレンスセンター 中会議室

懇親会費（一般）5,000円／（学生）4,000円

講演プログラム：詳細は下記HP

<http://ccinfo2013.ims.ac.jp/msschool/prog09.html>

問い合わせ・質問等は、[担当宛](#)にご連絡ください。

## <開催プログラム>

### ■ 2009年

#### 第1日目：12月15日(火)

|             |  |
|-------------|--|
| 9:30-10:20  | 受付   |
| 10:30-12:00 | 樋渡保秋先生（豊田理化学研究所）<br>「分子シミュレーション入門」         |
| 12:00-13:30 | 昼食休憩                                       |
| 13:30-15:00 | 上田 顕先生（京都大学）<br>「分子シミュレーションの基礎」            |
| 15:00-16:30 | 岡本祐幸先生（名古屋大学）<br>「分子シミュレーションにおける拡張アンサンブル法」 |
| 16:30-18:00 | 北尾彰朗先生（東京大学）<br>「集団座標による分子シミュレーションの解析」     |
| 18:00-19:30 | 三浦英昭先生（核融合科学研究所）<br>「高温プラズマシミュレーション」       |

#### ■ 第2日目：12月16日(水)

|             |   |
|-------------|---|
| 9:00-10:30  | 三上益弘先生（産業技術総合研究所）<br>「原子間・分子間相互作用エネルギー関数」   |
| 10:30-12:00 | 岡崎 進先生（名古屋大学）<br>「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」 |
| 12:00-13:30 | 昼食休憩  |
| 13:30-15:00 | 奥田 基先生（富士通株式会社）<br>「ペタスケールシミュレーションを目指す」     |
| 15:30-16:30 | 泰地真弘人先生（理化学研究所）<br>「高並列分子動力学計算」             |

|                    |  |
|--------------------|--|
| <b>16:30-18:00</b> | 牧野淳一郎先生（国立天文台）<br>「重力多体系シミュレーション用のアルゴリズムとハードウェア」 |
| <b>18:30-20:30</b> | 懇親会  |

■ 第3日目：12月17日(木)

|                    |  |
|--------------------|--|
| <b>9:00-10:30</b>  | 篠田 渉先生（産業技術総合研究所）<br>「粗視化分子シミュレーション」                         |
| <b>10:30-12:00</b> | 尾形修司先生（名古屋工業大学）<br>「固体物理と流体物理のスケールギャップを埋める 多階層型シミュレーション」     |
| <b>12:00-13:30</b> | 昼食休憩   |
| <b>13:30-15:00</b> | 松林伸幸先生（京都大学）<br>「エネルギー表示溶液理論と分子シミュレーションの 融合による溶液系の自由エネルギー解析」 |
| <b>15:00-16:30</b> | 泰岡顕治先生（慶応義塾大学）<br>「相変化現象のシミュレーション」                           |
| <b>16:30-18:00</b> | 茂本 勇先生（東レ株式会社）<br>「高分子材料設計における分子シミュレーション ～高分子電解質膜の例を中心に～」    |
| <b>18:00-19:30</b> | 奥村久士先生（分子科学研究所）<br>「分子動力学計算における温度・圧力制御手法」                    |

■ 第4日目：12月18日(金)

|                    |   |
|--------------------|---|
| <b>9:00-10:30</b>  | 渡辺宙志先生（東京大学）<br>「分子動力学法における温度制御の基礎」                   |
| <b>10:30-12:00</b> | 小田竜樹先生（金沢大学）<br>「第一原理分子動力学シミュレーションの基礎と応用」             |
| <b>12:00-13:30</b> | 昼食休憩  |
| <b>13:30-15:00</b> | 志賀基之先生（日本原子力研究開発機構）<br>「経路積分分子動力学法」                   |
| <b>15:00-16:30</b> | 前川禎通先生（東北大学）<br>「ナノサイエンス及びナノエレクトロニクスにおける 電子系シミュレーション」 |