

## スーパーコンピュータワークショップ2019のご案内

### 「凝縮系の構造、物性、ダイナミクス」

開催日 2019年12月19日(木)～20日(金)

会場 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

<http://www.orion.ac.jp/occ/>

参加費 無料

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、「凝縮系の構造、物性、ダイナミクス」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も企画しました。

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。

#### プログラム \*敬称略

##### 1日目 2019年12月19日 (木)

12:45-13:25 受付

13:25-13:30 はじめに

13:30-14:10 岡本祐幸 (名古屋大学) 「生体分子系の拡張アンサンブルシミュレーション」

14:10-14:50 高田彰二 (京都大学) 「分子シミュレーションと1分子イメージングの融合による生体分子動態研究」

15:10-15:50 杉田有治 (理化学研究所) 「レプリカ交換法による蛋白質・基質結合自由エネルギー計算」

15:50-16:30 鳥居 肇 (静岡大学) 「液体系のTHzおよび赤外スペクトルの理論計算に関わる現状と展望」

16:30-17:50 ポスター発表

18:00-19:30 懇親会 所長挨拶

##### 2日目 2019年12月20日 (金)

08:45-09:25 谷村吉隆 (京都大学) 「凝縮相中の分子の動的過程：散逸系の量子階層方程式 (HEOM) と多次元分光」

09:25-10:05 石田干城 (分子科学研究所) 「分子動力学シミュレーションによるイオン液体中でのセルロースの溶解・分解メカニズムの解明」

10:05-10:45 森田明弘 (東北大学) 「液体界面の構造と機能を解明する計算分子科学」

11:05-11:45 田中秀樹 (岡山大学) 「水、氷、包接水和物の安定性と熱物性」

11:45-12:25 岡崎 進 (名古屋大学) 「全原子分子動力学計算の高分子研究への展開」

12:25-12:30 おわりに

#### 懇親会

日時 12月19日 (木) 18:00～19:30

会場 岡崎コンファレンスセンター 中会議室

会費 4,000円(一般) / 3,000円(学生)

- ・予約制のため申込み後のキャンセルはご遠慮ください。
- ・急なキャンセルは、不参加でもお支払いいただく場合がございます。
- ・会費は受付時間に集金します、お釣りのないようお願いします。

#### ■ ポスター発表：

ポスターボードのサイズは、縦120cm×横90cmです。

#### ■ 宿泊について

- ・三島ロッジに宿泊を希望される方は参加登録の際に申し込んで下さい (1泊2600円)。但しロッジは数に限りがあり、希望に添えない場合もございます。

<http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/>

- ・ホテルはご自身で予約をお願い致します。  
近郊のホテル案内は下記URLをご参考ください。

<http://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

#### ■ 旅費・宿泊費の支援について

- ・支援はセンター利用者優先で、ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。  
\*民間企業の方への旅費支援、及びロッジのご利用はご遠慮いただいております。
- ・学生の場合は修士以上で、指導教官の許可 (印) が得られる方のみ支援可能です。  
\*学部生の参加は可能ですが旅費の支援はできません。  
\*学生の方は賠償付傷害保険の加入が参加条件となります。
- ・自然科学研究機構の旅費規程に基づき、所属機関からの往復交通費、日当及び宿泊費を支給します。  
\*前後に別用務で他機関にご出張される場合 (発着地が所属機関ではない場合) はこの限りではありませんのでその旨を事前にお知らせ願います。

\*飛行機をご利用の場合は搭乗券、領収書の提出が必要です。

開催日と間隔のあく搭乗日の場合、支援の対象外となる場合があります。特別な事情のある方は事前にご連絡をお願いします。

- ・登録口座への振込はワークショップ終了後、1～2ヶ月後となります。

参加 (旅費支援あり) 申込締切日：2019年11月29日 (金)

参加 (旅費支援なし) およびポスター発表の申込み締切日：2019年12月6日 (金)

参加登録は下記からお願いします

<https://registration.ims.ac.jp/scws2019/registration>

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 : scws2019\_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。

---