

スーパーコンピュータワークショップ2021

「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
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
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)

09:30-10:10	篠田涉 (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
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

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。