

次世代理論化学の新展開と 超並列計算への挑戦

開催日 2009年1月19日(月) 13:30 ~
21日(水) 15:00

会場 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

■ 招待講演

岡崎 進 (名古屋大学)	中井 浩巳 (早稲田大学)
片桐 孝洋 (東京大学)	中野 晴之 (九州大学)
加藤 毅 (東京大学)	町田 昌彦 (理化学研究所)
北浦 和夫 (京都大学)	宮原 友夫 (量子化学研究協会)
杉田 有治 (理化学研究所)	森川 良忠 (大阪大学)
高田 彰二 (京都大学)	諸熊 奎治 (京都大学)
高橋 大介 (筑波大学)	藪下 聡 (慶応義塾大学)
武次 徹也 (北海道大学)	柳井 毅 (分子科学研究所)
天能精一郎 (名古屋大学)	吉田 紀生 (分子科学研究所)
遠山 貴巳 (京都大学)	

■ ポスター発表

参加申込

■ 参加費：無 料 ■ 参加方法：下記ホームページをご覧ください。
<http://ccinfo.ims.ac.jp/workshop/2008/>

お問合せ

大学共同利用機関法人 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
TEL: 0564-55-7462 FAX: 0564-55-7025

計算科学研究センター・ワークショップ2009

「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」

1月19日(月)

座長：江原 正博（計算センター）

13:30-13:40 はじめに：平田 文男（分子研、計算センター長）

13:40-14:20 柳井 毅（分子科学研究所）
「大規模多参照電子状態計算のためのアルゴリズムとプログラム開発」

14:20-15:00 北浦 和夫（京都大学）
「フラグメント分子軌道法の最近の発展」

Break

座長：齊藤 真司（分子科学研究所）

15:30-16:10 宮原 友夫（量子化学研究協会）
「計算科学の巨大化：DNAや分子性結晶への応用」

16:10-16:50 諸熊 奎治（京都大学）
「化学反応の理解と設計への挑戦」

Break

17:00-18:30 ポスター発表

1月20日(火)

座長：石田 干城（分子科学研究所）

9:00-9:40 中野 晴之（九州大学）
「多参照摂動法とその効率的計算手法の開発とオリゴアセンの電子状態への応用」

9:40-10:20 藪下 聡（慶應義塾大学）
「共鳴状態、光イオン化過程の理論研究のための複素座標法の開発」

Break

座長：倉重 佑輝（分子科学研究所）

10:50-11:30 天能 精一郎（名古屋大学）
「高精度電子相関理論と高品位QM/MM法の開発」

11:30-12:10 中井 浩巳（早稲田大学）
「分割統治法に基づく次世代理論化学計算手法の開発」

昼食

座長：齊藤 真司（分子科学研究所）

13:30-14:10 高橋 大介（筑波大学）
「高速フーリエ変換の超並列計算に向けて」

14:10-14:50 町田 昌彦（理化学研究所）
「大規模行列対角化の並列アルゴリズム開発と量子力学の根本問題」

Break

座長：三浦 伸一（金沢大学）

15:20-16:00 吉田 紀生（分子科学研究所）
「タンパク質の分子認識：3D-RISM理論によるアプローチ」

16:00-16:40 岡崎 進（名古屋大学）
「汎用大規模分子動力学計算ソフトの高並列化」

16:40-17:20 遠山 貴巳（京都大学）
「動的密度行列繰り込み群法の開発と電子・格子結合系への適用」

Break

17:40 分子科学研究所 所長 挨拶 中村宏樹
-19:00 懇親会

1月21日(水)

座長： 安池 智一（分子科学研究所）

9:00-9:40 森川 良忠（大阪大学）
「界面におけるナノスケールプロセスの第一原理シミュレーション」

9:40-10:20 片桐 孝洋（東京大学）
「次世代計算機環境における固有値解法と自動チューニング機能の開発」

Break

座長： 保木 邦仁（東北大学）

10:50-11:30 加藤 毅（東京大学）
「強光子場中における分子の電子状態の記述と核軌跡の効率的計算手法」

11:30-12:10 武次 徹也（北海道大学）
「励起状態反応ダイナミクスと光化学への応用」

昼食

座長： 田中 成典（神戸大学）

13:30-14:10 杉田 有治（理化学研究所）
「膜タンパク質の分子動力学計算」

14:10-14:50 高田 彰二（京都大学）
「巨大生体分子複合系のマルチスケールシミュレーションに向けて」

14:50-15:00 おわりに： 江原 正博（計算センター）

計算科学研究センター・ワークショップにご参加いただきありがとうございました。講演資料は、「スーパーコンピュータワークショップ レポート 9」として後日郵送させていただきます。

ポスター発表

会場〈岡崎コンファレンスセンター 中会議室〉

- P01 Orbital quenching in cobalt(II) complexes as a means to control magnetic susceptibility: computational study
○Gergely Juhasz (Kyushu University)
- P02 Conductance photoswitching of diarylethenes
○Aleksandar Staykov (Kyusu University)、Yuta Tsuji、Kazunari Yoshizawa
- P03 Ab Initio& DFT& and DFTB studies of atomic hydrogen chemisorption on model
○Y. Wang、S. Irle (Nagoya Univerity)、K. Morokuma
- P04 Going Against the Shrinking Hot Giant Road: Growing C60 to C70 By Reaction With Carbon Atoms
○Stephan Irle (Nagoya University)、Sho Shindo、Keiji Morokuma
- P05 溶媒和自由エネルギー計算によるタンパク質のosmolyte効果の分子的及び熱力学的基礎の研究
○小久保裕功、B. M. Pettitt (University of Houston)
- P06 QM/MM自由エネルギーの変分・摂動的な定式化と解析的微分、凝縮相反応への応用
○山本武志 (京大院理)
- P07 水素結合構造とプロトン移動反応の準量子的解析
○安藤耕司 (京大院理)
- P08 生体分子のab initio非断熱遷移動力学
○石田俊正 (京都大学)、W. C. Chung、南部伸孝 (九州大学)、中村宏樹 (分子研)
- P09 分子の光電離過程に関する理論的研究
○田代基慶 (京大福井センター)
- P10 Generalized Born誘電体モデルを用いたQM/MM計算法の開発とその応用
○井上雄介、林 重彦 (京大院理)
- P11 分子動力学法による非線形多次元分光シグナルの計算
○長谷川太祐、谷村吉隆 (京大院理)

- P12 Density-fragment interaction approach for QM/MM calculations
○藤本和宏(京大院理)、Weitao Yang(Duke Univ.)
- P13 水-アミド混合溶液の液体構造および分子間ダイナミクスに関する理論的研究
○小野純一、谷村吉隆(京大院理)、斉藤真司(分子研)
- P14 鉄ピコリルアミン錯体のスピン状態間遷移速度の計算
○藤元栄介、安藤耕司(京大院理)
- P15 線形応答理論を用いた自由エネルギー計算法の開発と応用
○喜田龍一、加藤重樹、林重彦、東雅大(京大院理)
- P16 Direct SAC-CI法によるポルフィリン・アザポルフィリン化合物の吸収・発光スペクトル
○福田良一、中辻博(量子化学研究協会)
- P17 量子モンテカルロ法への動的アプローチ:変分経路積分分子動力学法の開発
○三浦伸一(金沢大院自然)
- P18 特異な分子間相互作用を利用した新奇蛍光性分子設計への理論的アプローチ
○斉田謙一郎、南部伸孝、中園学、財津潔、関谷博(九州大学)
- P19 陽イオン交換樹脂のイオン交換基と金属イオン選択性の相関に関する計算シミュレーション研究
○平野龍、杉本学(熊本大院自然科学)
- P20 DNA-水分子間相互作用:水分布の塩基配列依存性
○吉田智喜、相田美砂子(広島大院理・広島大QuLiS)
- P21 水クラスターの水素結合パターンによる分類と自由エネルギー計算
○赤瀬大、相田美砂子(広島大院理・広島大QuLiS)
- P22 量子化学計算によるペロブスカイトの機能発現機構の解明
○大西拓(三重大院工)
- P23 高分子電解質膜の第一原理計算
(産総研¹、豊田中研²)○崔隆基¹、土田英二¹、池庄司民夫¹、山川俊輔²、兵頭志明²

- P24 フラグメント分子軌道法を用いた経路積分分子動力学法の開発
○藤田貴敏、渡邊博文、田中成典(神戸大人間発達環境学、JST-CREST)
- P25 フラグメント分子軌道法を用いたポリペプチドのESP電荷の決定と古典MDへの応用
(神戸大院¹、JST-CREST²、みずほ情報総研³、国立衛研⁴、立教大⁵、岐阜大人獣感染防御研究センター⁶)○沖山佳生^{1,2}、渡邊博文^{1,2}、福澤 薫³、中野達也^{2,4}、望月祐志^{2,5}、石川岳志⁶、蛭名邦禎¹、田中成典^{1,2}
- P26 赤血球凝集反応実験と量子化学計算によるインフルエンザウイルス・ヘマグルチニンの変異予測
○竹松和友(神戸大学)、福澤 薫、尾曲克巳、中島捷久、中島節子、中野達也、望月祐志、渡邊博文、田中成典
- P27 ペプチド鎖の1次元・2次元振動スペクトルの理論計算と形状解析
○鳥居 肇(静岡大学)
- P28 Dual-level密度汎関数理論における解析的勾配法の開発
(早大理工学術院¹、東大院工²)○佐藤 健¹、中嶋隆人²、中井浩巳¹、平尾公彦²
- P29 Moller-Plesset法を拡張した簡便な多配置摂動法: APSG参照関数への適用
○小林正人、Agnes Szabados、Peter R. Surjan、中井浩巳(早大先進理工、エトヴェシュ大)
- P30 電子の振動伝播の実時間発展TDHF/TDDFTによる追跡
○赤間知子、中井浩巳(早大先進理工)
- P31 3D-RISM理論を用いたミオグロビンにおけるリガンド分子の脱着過程に関する理論的研究
(総研大¹、分子研²、理研³)○清田泰臣¹、吉田紀生^{1,2}、今井隆志³、平田文男^{1,2}
- P32 Alq3と金属表面の界面に関する理論的研究
○柳澤 将、森川良忠(阪大産研)
- P33 巨大多核金属錯体の電子状態と物性の量子化学計算
○北河康隆、中西康之、斉藤 徹、川上貴資、奥村光隆(阪大院理)
- P34 光合成反応中心スペシャルペアの電子非対称性に関する理論解析
○山崎秀樹、鷹野 優、中村春木(大阪大学)

- P35 酸素運搬タンパク質ヘムエリスリンの活性中心の電子構造に関する理論的研究
○鷹野 優、小泉健一、山口 兆、中村春木(大阪大学)
- P36 人工Metal-DNAの磁性と電気伝導の理論的評価
○中西康之、北河康隆、斉藤 徹、川上貴資、奥村光隆(阪大院理)、
重田育照(兵庫県立大)、松井 亨(東大院工)
- P37 フラグメントベースレプリカ交換法とその自動チューニング機構の開発
○鈴木正昭、奥田洋司(東京大学)
- P38 紅色細菌の光合成電子伝達機構の理論的解明
○下田 優、常田貴夫、平尾公彦(東大院工)
- P39 同時ブロック対角化に基づく非線形相関モードの抽出
○桜庭 俊(東大新領域)、城地保昌(東大分生研)、北尾彰朗(東大分生研)
- P40 流れによる赤血球、脂質小胞の変形
○野口博司(東大物性研)
- P41 酵素 purple acid phosphatase 活性中心の電子状態計算
○小泉健一(大阪大学蛋白質研究所)
- P42 第一原理分子動力学計算による水和したDNA二重鎖中の電荷移動機構の解析
○若林 一、塚本貴志、栗田典之(豊橋技術科学大学)、Yasuyuki Ishikawa(プエルトリコ大学)
- P43 密度汎関数法に基づく金電極間のDNA二重鎖の電気伝導特性の解析
○塚本貴志、若林 一、仙石康雄、栗田典之(豊橋技術科学大学)
- P44 分子シミュレーションによるサーモリシンとリガンド間の特異的相互作用の解析
○出立兼一、栗田典之(豊橋技術科学大学)、Mahmud T. H. Khan、Ingebrigt Sylte(トロムソ
大学)
- P45 MPI/OpenMPハイブリッド並列によるHartree-Fock法の超並列計算手法の開発
○石村和也、倉本 圭、生田靖弘、兵頭志明(豊田中研)
- P46 DFTB/MD simulations of high-temperature annealing of open-ended (n,n) SWNTs for n=3 to 10
○原 裕訓、一ノ瀬元喜、Stephan Irle(名古屋大学)

P47 Quantum Chemical Simulations of Acetone Adsorption on SWCNTs

○Yoshifumi Nishimura、Stephan Irle (Nagoya University)、Dmitry Kazachkin、Eric Borguet (Temple University)

P48 空気-水界面におけるクマリン分子の非線形感受率と についての理論的研究

○渡邊秀和、山口祥一、田原太平 (理研田原分子分光)、森田明弘 (東北大院理)、南部伸孝 (九大情報)

P49 キラルブレinstedd酸触媒を用いた不斉合成反応の理論的研究

○山中正浩、平田 敬 (立教大学)

P50 ポリシラン類の物性に関する理論的研究

○田口尚貴 (立教大)、望月祐志 (立教大・JST-CREST)、石川岳志 (岐阜大)、中野達也 (国立衛生研・JST-CREST)、森 寛敏 (お茶大・JST-CREST)、三好永作 (九大院・JST-CREST)、田中成典 (神戸大院・JST-CREST)

P51 スレーター行列式を用いたプロジェクトモンテカルロ法

○大塚勇起、永瀬 茂 (分子研)

P52 密度行列繰込み群を用いた大規模多配置理論の開発

○倉重佑輝、柳井 毅 (分子研)

P53 水の等圧比熱の特異的温度依存性および2次元赤外分光法による水中のエネルギー緩和機構

○齊藤真司 (分子研)

P54 高精度電子状態理論による理論精密分光

○江原正博 (分子研)

平成21年度 利用申請A (CPU時間1000時間) 随時受付中

Gaussian、AMBER、GAMESS、Molpro 等ライブラリ充実!

利用資格、申請方法など詳しくは、下記のWebページをご覧ください。

<http://ccinfo.ims.ac.jp/center/utilization.html>

問い合わせ先 Email: ccadm@draco.ims.ac.jp

電話: 0564-55-7462

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