



文部科学省 「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」
HPCI 戦略分野2 「新物質・エネルギー創成」
計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
計算分子科学研究拠点 第3回研究会

主催：分子科学研究所 計算分子科学研究拠点

日時：2012年10月9日(火) 13:30 ~ 17:55 及び 懇親会
2012年10月10日(水) 9:30 ~ 16:25

場所：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 大会議室
施設マップ <http://www.ims.ac.jp/location/shonai.html>
アクセス <http://www.ims.ac.jp/location/access.html>

白15番の建物です。
最寄駅は名鉄名古屋本線 東岡崎駅です。

参加費：無料(但し、懇親会は5,000円)

懇親会：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 中会議室

参加登録：以下のホームページより受付中。

<http://tcci.ims.ac.jp/tcci/event/workshop9.html>

***参加お申込締切:2012年9月25日(火)**

お問い合わせ先：〒444-8585 岡崎市明大寺町西郷中38

分子科学研究所 計算分子科学研究拠点事務局

電話：0564-55-7074 (発信音の後、暫くお待ちください)

Fax: 0564-54-2254 (代表), 0564-55-7074 (発信音の後) 5 3

E-mail: tcci-office@yfep2.ims.ac.jp

※アドレス中の「@」は、半角にしてお送り下さい。

講演プログラム

第1日目 2012年10月9日(火) 13:30 ~ 17:55

★ セッション1：ご挨拶、特別講演、招待講演、CMSI 研究員発表

13:30 - 13:40 (東大院総合文化/分子研) 高塚 和夫 開会の辞、拠点報告

13:40 - 13:45 (分子科学研究所長) 大峯 巖 ご挨拶

13:45 - 13:50 (文部科学省研究振興局情報課計算科学推進室長) 林 孝浩 ご挨拶

13:50 - 14:35 (京大院工) 田中 庸裕 特別講演 「触媒化学で解きたいこと—光触媒のメカニズムとナノ粒子創成のダイナミクス」

14:35 - 15:05 (横浜市大院総合理工) 池口 満徳 招待講演1 「F1分子モーターの分子シミュレーション」

15:05 - 15:25 (東大院総合文化/東大院工) 城野 亮太 講演1 「有機・色素増感型太陽電池の基礎過程の研究」

15:25 - 15:45 (名大院工) 藤本 和士 講演2 「ミセルの理論的研究：生成、構造安定性、可溶化」

15:45 - 16:05 休憩

★ セッション2：将来のHPCIについて

16:05 - 16:35 (理研AICS) 富田 浩文 招待講演2 「将来のHPCIのあり方調査研究について—アプリケーション分野の立場から—」

16:35 - 17:05 (理研AICS) 杉田 有治 招待講演3 「ライフサイエンス分野での将来のHPCIのあり方について」

17:05 - 17:55 (分子研)
(分子研)
(名大院工) 信定 克幸,
石村 和也,
安藤 嘉倫 TCCI内報告 「将来のHPCIのあり方調査研究に対する取り組み」

17:55 - 18:10 移動休憩

18:10 - 20:00 ☆懇親会 @自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 中会議室
会費 ¥5000 予定

第2日目 2012年10月10日(水)

9:30 ~ 16:25

★ セッション3 : CMSI 研究員発表

- | | | | | |
|---------------|--------------|---------------|------|--|
| 9:30 - 9:50 | (神戸大院システム情報) | 大西 裕也 | 講演 3 | 「露わに相関した三次の摂動エネルギーに関する理論的研究」 |
| 9:50 - 10:10 | (神戸大院システム情報) | 大塚 勇起 | 講演 4 | 「スレーター行列式を使用した量子モンテカルロ法 : F12法との組み合わせによる高精度計算」 |
| 10:10 - 10:30 | (分子研/名大院工) | Qing-Miao Nie | 講演 5 | 「Free energy landscapes of interacting myosin II and actin filament in the coupled sliding and binding processes of force-generation: A parallel molecular dynamics study」 |
| 10:30 - 10:50 | 休憩 | | | |

★ セッション4 : CMSI 研究員発表

- | | | | | |
|---------------|------------|-------|------|-----------------------------------|
| 10:50 - 11:10 | (分子研) | 野田 真史 | 講演 6 | 「実時間・実空間電子ダイナミクス法プログラムの開発の現状」 |
| 11:10 - 11:30 | (分子研/名大院理) | 榮 慶丈 | 講演 7 | 「タンパク質の折り畳みシミュレーションに関するこれまでの取り組み」 |
| 11:30 - 11:50 | (分子研/京大化研) | 水口 朋子 | 講演 8 | 「膜貫通タンパク質の膜内配置に関する自由エネルギー解析」 |
| 11:50 - 13:20 | 昼食・休憩 | | | |

★ セッション5 : 招待講演

- | | | | | |
|---------------|---------|-------|--------|--|
| 13:20 - 13:50 | (鳥取大院工) | 吉本 芳英 | 招待講演 4 | 「GPUを活用したhybrid型交換相関汎関数の平面波基底第一原理計算プログラムへの実装と水分子系への応用」 |
|---------------|---------|-------|--------|--|

★ セッション6 : 将来のHPC Iについて

- | | | | | |
|---------------|--|------|--|--------------------|
| 13:50 - 14:30 | | 自由討論 | | 「将来のHPCIと分子科学について」 |
|---------------|--|------|--|--------------------|

14:30 - 14:50 休憩

★ セッション7 : CMSI 研究員発表、まとめ

- | | | | | |
|---------------|---------------|--------|----------|--|
| 14:50 - 15:10 | (分子研/早大院先進理工) | 西澤 宏晃 | 講演 9 | 「大規模分子動力学計算を目指した分割統治型理論と並列化手法の開発」 |
| 15:10 - 15:30 | (岡山大院自然科学) | 矢ヶ崎 琢磨 | 講演 10 | 「水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性」 |
| 15:30 - 15:50 | (分子研/金沢大理工) | 河津 励 | 講演 11 | 「インスタントを用いたトンネル分裂の計算」 |
| 15:50 - 16:10 | (東大院総合文化) | 米原 文博 | 講演 12 | 「密集した励起状態を遍歴する電子の動力学と光化学過程における波束の非断熱分岐の記述」 |
| 16:10 - 16:25 | (分子研) | 高塚 和夫 | まとめ、閉会の辞 | |

※プログラムは予告なく変更する場合がございます。予めご了承の程よろしく申し上げます。