

## 「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」

|     |  |
|-----|--|
| 日時  | 平成 21年 1月19日(月) 13:00 ~ 21日(水) 15:00   |
| 会場  | 自然科学研究機構 <a href="#">岡崎コンファレンスセンター</a> |
| 参加費 | 無料                                     |

- [プログラム \(ポスター発表を含む\)](#)
- 参加登録・ポスター発表： [こちらから登録してください。](#)

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の方々に共同利用していただいております。この超高速かつ大規模な計算環境は分子科学、物性科学、生物科学の研究に活用されており、分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。理論計算は実験においても反応の解析や物性などの研究に広く利用されるようになりました。これらの観点から、最先端の理論化学とその発展を理解し、新しい展開を計ることを目的としたワークショップを企画しました。

また、次世代スパコンを活用した超並列計算により、これまでになく大規模な理論研究が可能となり、現在、この超並列計算に向けた様々な取り組みが進められています。

そこで本ワークショップでは、「次世代理論化学の新展開」と「超並列計算への挑戦」という2つの重要なテーマについて議論することを目的としました。理論科学の最前線で活躍されている方々をお招きして、理論の新しい展開について紹介していただくと同時に、次世代スパコンにおける超並列計算を目指した計算手法を開発されておられる方々に、超並列計算への取り組みについてご紹介いただきます。背景や理論・方法に重点をおいて解説していただき、それぞれの分野における将来について展望していただきます。

また、一昨年から設置した超大規模計算の施設利用S課題の研究発表もしていただきます。さらに、実験研究者の方や大学院生の皆さん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。

**幅広い分野からのご参加を期待しております。**

## プログラム

1月19日(月)

|               |  |
|---------------|--|
| 13:30 - 13:40 | はじめに 平田文男(センター長)                               |
| 13:40 - 14:20 | 柳井 毅 (分子研)<br>「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)<br>「フラグメント分子軌道法の最近の発展」              |
| 15:00 - 15:30 | Break  |
| 15:30 - 16:10 | 宮原友夫 (量子化学研究協会)<br>「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・福井セ)<br>「化学反応の理解と設計への挑戦」             |
| 16:50 - 17:00 | Break  |
| 17:00 - 18:30 | <a href="#">ポスター発表</a>                         |

1月20日(火)

|               |   |
|---------------|---|
| 9:00 - 9:40   | 中野晴之 (九州大)<br>「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 (慶応大)<br>「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」       |
| 10:20 - 10:50 | Break   |
| 10:50 - 11:30 | 天能精一郎 (名古屋大)<br>「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)<br>「分割統治法に基づく次世代理論化学計算手法の開発」            |
| 12:10 - 13:30 | 昼食  |
| 13:30 - 14:10 | 高橋大介 (筑波大)<br>「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 (理研)<br>「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」        |

|               |  |
|---------------|--|
| 14:50 - 15:20 | Break  |
| 15:20 - 16:00 | 吉田紀生 (分子研)<br>「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)<br>「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)<br>「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」 |
| 17:20 - 17:40 | Break  |
| 17:40 - 19:00 | 分子研所長挨拶 中村宏樹<br>懇親会                          |

1月21日 (水)

|               |   |
|---------------|---|
| 9:00 - 9:40   | 森川良忠 (大阪大)<br>「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)<br>「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」 |
| 10:20 - 10:50 | Break   |
| 10:50 - 11:30 | 加藤 毅 (東京大)<br>「強光子場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)<br>「励起状態反応ダイナミクスと光化学への応用」           |
| 12:10 - 13:30 | 昼食  |
| 13:30 - 14:10 | 杉田有治 (理研)<br>「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)<br>「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  |

- 懇親会：  
1月20日 (月) 岡崎コンファレンスセンター 中会議室  
懇親会会費 4000円(一般)/2000円(学生)
- 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) : :  
\*ロッジは部屋に限りがあり、ご希望に添えない場合がございます。  
\*三島ロッジ以外のホテルをご希望の方は各自でご予約をお願いします。  
下記URLをご参考ください。  
<http://www.ims.ac.jp/location/hotel.html>
- 旅費・宿泊費のサポートについて：  
\*学生の場合は修士以上のみサポート可能です。  
\*旅費・宿泊費をサポートするには、銀行口座登録が必要となりますので、ワークショップ事務局(e-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp))までご連絡ください。  
\*ワークショップ前後の他の出張等がある場合は、その日程・場所・旅費・日当の支給の有無をお知らせ下さい。

**\*学術支援以外の旅費の支給、及びロッジのご利用はご遠慮いただいております。**

**旅費希望の参加およびポスター発表の申込締切日：2008年12月26日 (金)**

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3番地  
TEL: 0564-55-7462  
FAX: 0564-55-7025  
E-mail: [workshop@draco.ims.ac.jp](mailto:workshop@draco.ims.ac.jp)