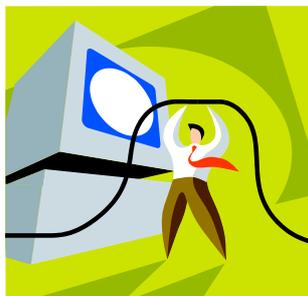


Research Center for Computational Science

スーパーコンピュータ ワークショップ2010

「大規模並列分子シミュレーションの最前線」

日時： 2010年1月13日(水)～14日(木)
場所： 講演 … 岡崎コンファレンスセンター 大会議室
懇親会 … 同 中会議室
ポスター発表 … 同 中会議室



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

プログラム

1月13日(水)	
13:30 – 13:40	はじめに 平田文男 (計算科学研究センター長)
座長 石田干城 (分子研)	
13:40 – 14:20	池口満徳 (横浜市立大学) 「DNA 結合タンパク質の機能ダイナミクス」
14:20 – 15:00	北尾彰朗 (東京大学) 「大規模分子動力学によるバイオナノマシンの機能シミュレーション」
15:00 – 15:20	休憩
座長 安池智一 (分子研)	
15:20 – 16:00	佐藤啓文 (京都大学) 「溶液の理論化学：水溶液、イオン液体、蛋白質」
16:00 – 16:40	宮田竜彦 (分子科学研究所) 「MD/3D-RISM 連成計算法の開発と応用」
16:40 – 17:20	山本武志 (京都大学) 「QM/MM 法を用いた化学反応の自由エネルギー計算と反応経路の探索」
17:20 – 18:30	ポスター発表
18:30 – 20:30	懇親会 挨拶 中村宏樹 (分子科学研究所長)

1月14日(木)	
座長 福田良一 (分子研)	
9:00 – 9:40	佐藤三久 (筑波大学) 「次世代スパコンに向けた計算機科学と計算科学の連携にむけて - e-サイエンスプロジェクトとナノ拠点での連携から -」
9:40 – 10:20	町田昌彦 (日本原子力研究開発機構) 「行列対角化と密度行列繰りこみ群の超並列化: 強相関非平衡量子多体系 の理解へ向けて」
10:20 – 10:40	休憩
座長 金 鋼 (分子研)	
10:40 – 11:20	伊藤伸泰 (東京大学) 「計算機シミュレーションによる非平衡状態の研究」
11:20 – 12:00	松本充弘 (京都大学) 「固体熱伝導解析 –フォノン工学のためのD SMC法コードの開発–」
12:00 – 13:30	昼食
座長 田中康寛 (分子研)	
13:30 – 14:10	森田明弘 (東北大学) 「界面非線形分光の分子シミュレーション計算手法の開発」
14:10 – 14:50	常行真司 (東京大学) 「波動関数理論にもとづく凝縮系の電子状態計算」
14:50 – 15:30	山本量一 (京都大学) 「ソフトマターのマルチスケールシミュレーション」
15:30 – 15:50	休憩
座長 大塚勇起 (分子研)	
15:50 – 16:10	有田俊雄 (NVIDIA ジャパン) 「GPU コンピューティングの現在と未来」
16:10 – 16:50	田村陽介 (フィックスターズ) 「CUDA によるプログラム手法と応用事例」
16:50 – 17:00	おわりに 奥村久士 (計算科学研究センター)

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 10」として後日郵送させていただきます。

ポスター発表

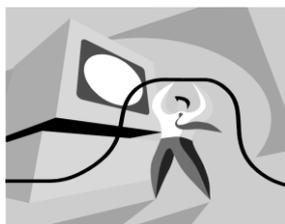
会場〈岡崎コンファレンスセンター 中会議室〉

- P01 ポリマー材料の粗視化模型の変形に関する超並列MD計算
○萩田克美(防衛大学校)
- P02 ペロブスカイトを用いたリチウムイオン伝導体の材料設計
○大西 拓(三重大院工)
- P03 Rigged QED理論に基づくアルミニウムクラスターの理論的研究
○平井浩介(京都大院工)
- P04 Systolic並列アルゴリズムを用いたBoys localizationの実装について
○伊井隆浩、関野秀雄(豊橋技術科学大学)、Robert J. Harrison(University of Tennessee)
- P05 Prediction of binding mechanism of beta-amyloid 42 peptides with GM1/SM/CHL membrane
○山岸純也(千葉大学・理研)、沖本憲明(理研)、星野忠次(千葉大学)
- P06 ゼオライト細孔によるホルムアルデヒドの安定捕捉に関する計算化学的考察
○富田満、増井洋一、尾中篤(東京大院理)
- P07 拡張アンサンブル分子動力学法によるスリット細孔に閉じ込められたLennard-Jones粒子の固液相転移
○金子敏宏、美馬俊喜、光武亜代理、泰岡顕治(慶應義塾大院理工)
- P08 DFTB/MD simulations of functionalized open-ended SWCNTs annealing under high-T
○原 裕訓、Genki Ichinose、Stephan Irle(名古屋大院理)
- P09 GPU超並列とMPI並列の共存による第一原理計算法の高速化
○伴野秀和(明治大学)、青木優(静岡産業大学)、円谷和雄(明治大学)
- P10 GPUコンピューティングによるオービタルフリー第一原理計算の高速化
○青木 優(静岡産業大学)、伴野秀和(明治大学)、円谷和雄(明治大学)

- P11 カルボニル化合物のヒドリド還元における溶媒効果シミュレーション
○金野大助(高知大院総合)
- P12 UVプロテクトの光化学—methoxy cinnamatesの光物性—
○江原正博、Malinee Promkatkaew、Supa Hannongbua(分子研、Kasetsart Univ.)
- P13 3D-RISMの高速化対応:超並列マシンに向けて
(分子研¹、筑波大²)○丸山 豊¹、吉田紀生¹、多田野寛人²、高橋大介²、佐藤三久²、平田文男¹
- P14 特異的温度依存性を示す水の比熱を生み出す揺らぎ
○齊藤真司(分子研)、B.Bagchi(IISc)、大峯 巖(京都大福井センター)
- P15 New Mechanism of Proton Transportation through Influenza A M2 Channel: 3D-RISM Study
○Saree Phongphananee、Thanyada Rungrotmongkol、Norio Yoshida、Fumio Hirata(IMS)
- P16 ペプチドの分子動力学シミュレーション
○奥村久士(分子研)
- P17 QM/MM/3D-RISMの開発と応用
○吉田紀生、平田文男(分子研)
- P18 これからの共同利用スーパーコンピュータセンターの運用方針の提案
○西川武志(東京工業大学)
- P19 Valence ionized states studied by SAC-CI and PIES
○福田良一、江原正博(分子研)、中辻博(量子化学研究協会)、岸本直樹(東北大学)、大野公一(豊田理化学研究所)
- P20 ガラスの動的不均一性とその時間スケールに関する考察: Stokes-Einstein則の破れを例にして
○金 鋼、齊藤真司(分子研)
- P21 Electronic Properties of Scandium Carbide Endohedral Fullerenes Sc₂(C₂)@C₈₂: Comparison Between DFT and DFTB
○西本佳央、Stephan Irle(名古屋大学)

- P22 高分子流体のための粒子法—高分子接続シミュレーション
○村島隆浩、谷口貴志(京大院工、JST-CREST)
- P23 ペタフロップスマシンに向けた密度行列くり込み群法の大規模並列化手法
○山田進、今村俊幸、奥村雅彦、五十嵐亮、町田昌彦(日本原子力研究開発機構)
- P24 Double core-hole states of small molecules
○田代基慶(分子研)、江原正博(分子研)、福澤宏宣(東北大)、上田潔(東北大)、C. Buth(SLAC)、
N. Kryzhevoi(Heidelberg Univ.)、L.S. Cederbaum(Heidelberg Univ.)
- P25 3次赤外分光による水の分子間運動の理論的研究
○矢ヶ崎琢磨、齊藤真司(分子研)
- P26 イオン強結合状態における荷電コロイド系の分子動力学シミュレーション
○浦長瀬正幸、山本量一(京都大院工)
- P27 GTP結合型Rasの構造と機能
○小林千草、齊藤真司(分子研)
- P28 ポワソン・ガウス混合補助基底を用いた周期境界条件RI-MP2法
○河東田道夫、永瀬 茂(分子研)
- P29 細胞膜模倣脂質二重層膜の分子動力学計算
○安藤嘉倫、岡崎 進(名古屋大院工)
- P30 密度汎関数理論に基づくQM/MM理論
その1:線形応答関数に基づく分子系電子構造の局在性・非局在性
○山中秀介(大阪大蛋白研)、米澤康滋(大阪大蛋白研)、西原慧径(大阪大理)、中田一人(NEC)、
奥村光隆(大阪大理)、高田俊和(理研)、山口 兆(豊田理研)、中村春木(大阪大蛋白研)
- P31 Multi-scale simulation for polymer melt flows in parallel plates
○安田修悟(京都大学)
- P32 亜鉛フィンガーの DNA 認識機構:分子動力学計算とフラグメント分子軌道計算による理論的研究
○森 寛敏、能登 香(お茶の水女子大学)

- P33 生体免疫機能に関する糖鎖-タンパク質間相互作用解析:シグレック7の場合
○能登 香、伊瀬聖子、森 寛敏、鷹野景子(お茶の水女子大学)
- P34 3D-RISM理論による嗅覚受容体の分子認識機構に関する理論的研究
(総研大¹、分子研²)○清田泰臣¹、吉田紀生^{1,2}、平田文男^{1,2}
- P35 Ras-GAP内でのGTP加水分解反応に関する理論的研究
○東 雅大、小林千草、齊藤真司(分子研)
- P36 光合成反応中心スペシャルペアの電子構造解析
○山崎秀樹、鷹野優、中村春木(大阪大蛋白研)



平成22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。

<https://ccportal.ims.ac.jp/node/55>

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