

「第9回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」

「TCCI ウィンターカレッジー分子シミュレーションー」

2015年10月13日から16日までの日程で自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにおいて「分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」「TCCI ウィンターカレッジー分子シミュレーションー」を開催いたします。講義は学部卒業程度の知識があれば理解できるような内容となっており、特にシミュレーションの経験や専門知識は前提としていません。これから分子シミュレーションを始めようとしておられる学部学生や大学院生、または実験家や企業の研究者など、計算科学に興味がある方々のご参加をお待ちしております。

世話人

分子科学研究所 奥村久士

名古屋大学 吉井範行

主催：自然科学研究機構分子科学研究所、計算分子科学研究拠点（TCCI）

共催：分子シミュレーション研究会、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)、HPCI コンソーシアム

会場：岡崎コンファレンスセンター

<http://www.orion.ac.jp/occ/>

会期：2015年10月13日（火）～10月16日（金）

参加費：無料

懇親会：10月15日（木）18：30～

懇親会費 （一般）4,000円／（学生）3,000円

予約制のためキャンセルはご遠慮下さい。

不参加でもお支払いいただく場合がございます。

初日の受付時に集金いたします。お釣りのないようお願いいたします。

プログラム *都合により変更になる場合もございます。

第1日目：2015年10月13日（火）

13:15-13:45 受付

13:45-14:00 開会式

- 14:00-15:00 樋渡保秋先生 (金沢大学名誉教授)
「分子シミュレーションが予測・発見の科学って、どういう意味？」
- 15:10-16:40 松本充弘先生(京都大学)
「シミュレーションの全体像・概論」
- 16:50-18:20 松林伸幸先生(大阪大学)
「統計熱力学の概要」

第2日目：2015年10月14日(水)

- 9:00-10:30 吉井範行先生(名古屋大学)
「力学、解析力学、数値解法、拘束動力学」
- 10:40-12:10 篠田渉先生(名古屋大学)
「階層的分子モデルによる MD-全原子モデルを元にした粗視化分子モデルの構築」
- 12:10-13:30 昼 食
- 13:30-15:00 金 鋼先生 (新潟大学)
「ガラス」
- 15:10-16:40 松本正和先生 (岡山大学)
「可視化・解析」
- 16:50-18:20 三上益弘先生(慶應義塾大学)
「原子間・分子間相互作用エネルギー関数と長距離力計算法」

第3日目：2015年10月15日(木)

- 9:00-10:30 安藤嘉倫先生(名古屋大学)
「分子シミュレーションの高速・並列化」
- 10:40-12:10 長岡正隆先生(名古屋大学)
「化学反応と分子シミュレーション」
- 12:10-13:30 昼 食
- 13:30-15:00 奥村久士先生(分子科学研究所)
「各種統計アンサンブルの生成法」
- 15:10-16:40 森田明弘先生 (東北大学)
「コンピュータシミュレーションと理論化学」
- 16:50-18:20 山下雄史先生 (東京大学)
「分子シミュレーションの創薬応用」
- 18:30-20:00 懇親会

第4日目：2015年10月16日（金）

9:00-10:30 高野 宏先生（慶応大学）

「高分子」

10:40-12:10 岡崎 進先生(名古屋大学)

「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」

12:15-12:30 閉会式・修了書授与

■宿泊について

*ご自身でホテルの予約をお願いします。近郊ホテルの案内は、
下記 URL をご参考ください。

<https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

■交通費のサポートについて

*学生限定(予算と人数に限りがあり先着順となります。

ご希望にそえない場合もございます。)

*往復交通費(自然科学研究機構規定額)を支給します。

*所定の手続きをしていただき、一、二か月後、口座振り込みとなります。

■学生の方は、賠償付障害保険の加入が参加の条件です。

参加ご希望の方は9月22日（火）までに、下記からご登録ください。

<https://registration.ims.ac.jp/mss2015/registration>

■分子シミュレーションスクールおよびホームページに関する 問い合わせ先:

自然科学研究機構 分子科学研究所

分子シミュレーションスクール事務局

〒444-8585 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

E-mail: school@draco.ims.ac.jp