

日時： 2013年10月30日 13：30-15：00

場所： 研修室

フォーカストセッション
(ポスター口頭発表 第1分野)

フラグメント分子軌道法の最近の展開：実利用へ向けた開発と応用

開催趣旨：

フラグメント分子軌道(FMO)法は、生体分子をはじめとする巨大系の量子化学計算に適した手法であり、CBI学会においても、主要な研究テーマの一つとして、活発な議論が繰り広げられてきた。特に、最近は、次世代スパコン「京」の稼働と相まって、FMO法の実利用への期待が高まってきている。本セッションでは、実際のプログラム開発や応用計算に携わる若手研究者の方々に、FMO法の実利用へ向けた最近の研究展開についてお話頂く。

モデレーター： 石川 岳志 Takeshi Ishikawa

長崎大学医歯薬学総合研究科

プログラム：

1. FMO-based electron density analysis to protein structure refinement

○Chiduru Watanabe¹ Kaori Fukuzawa^{1,2} Yoshio Okiyama¹ Akifumi Kato² Takayuki Tsukamoto² Shigenori Tanaka³ Yuji Mochizuki^{1,4}

¹Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, ²Mizuho Information & Research Institute Inc.,

³Graduate School of System Informatics, Department of Computational Science, Kobe University, ⁴Department of Chemistry & Research Center for Smart Molecules, Faculty of Science, Rikkyo University

2. FMO-based cluster analysis for drug design by multi-dimensional scaling

○Ryo Kurauchi¹ Shigenori Tanaka¹ Kaori Fukuzawa² Akifumi Kato² Chiduru Watanabe³ Yoshio Okiyama³ Yuji Mochizuki⁴ Tatsuya Nakano⁵

¹Graduate School of System Informatics, Kobe University, ²Mizuho Information & Research Institute Inc.

³Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, ⁴Rikkyo University, ⁵National Institute of Health Sciences

3. FMO calculations with ABINIT-MP on K-computer

○Yoshio Okiyama¹ Chiduru Watanabe¹ Kaori Fukuzawa^{1,2} Shigenori Tanaka³ Yuji Mochizuki^{1,4}

¹Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, ²Mizuho Information & Research Institute Inc.,

³Graduate School of System informatics, Kobe University, ⁴Faculty of Science, Rikkyo University,

4. Application of FMO method to interaction analysis of biomolecules

○Takeshi Ishikawa¹

¹Department of Molecular Microbiology and Immunology, Graduate School of Biomedical Sciences, Nagasaki University