

日時: 2014 年 10 月 30 日 (木) 15:30-17:40

場所: 研修室

フォーカストセッション

第 8 回 FMO 研究会「ナノバイオ分子計算とデザイン」

Molecular Simulation and Design for Nano- and Biomolecular system

開催趣旨:

第 8 回となる今回は、FMO の開発と応用の両方を手掛けている先生方を招待して、両面から FMO の進捗状況、可能性、問題点などを発表いただく。京などの超並列計算機対応のソフト開発、QM/MM 法の導入、他の計算方法と FMO 法の組み合わせなど、ソフト・方法開発と、さらに、ナノバイオシステムへの FMO と関連の計算化学手法について、大いに議論したい。

モデレーター: 古明地 勇人 Yuto Komeiji

産業技術総合研究所バイオメディカル研究部門
Biomedical Research Institute, AIST Tsukuba Central

福澤 薫 Kaori Fukuzawa

日本大学松戸歯学部 School of Dentistry at Matsudo, Nihon University

第一原理計算に基づくタンパク質機能デザイン

重田 育照 Yasuteru Shigeta

筑波大学 University of Tsukuba

酵素反応やタンパク質機能の制御に向けて、第一原理計算、分子動力学シミュレーションの各種手法を駆使した最新の研究例を紹介する。FMO の結果だけでなく、酵素反応解析、MD シミュレーションによるタンパク質折りたたみ、基質結合、誘導適合などについて講演する予定である。

ABINIT-MP の京での性能について

望月祐志 Yuji Mochizuki

立教大学 Rikkyo University

ABINIT-MP プログラムの最近の開発状況、特に京コンピュータへの移植と性能評価について紹介する。

FMO 計算プログラム ABINIT-MP の開発と溶媒効果

沖山 佳生

理化学研究所 ライフサイエンス技術基盤研究センター RIKEN

これまで ABINIT-MP に実装してきた機能の中で、特に Poisson-Boltzmann 方程式に基づいた溶媒モデルと FMO 法との連携に関して最近の進捗を紹介し、今後の創薬への応用展開について講演する。

FMO 法を用いた最近の研究-PAICS の開発と生命科学への応用

石川 岳志 Takeshi Ishikawa

長崎大学医歯薬学総合研究科 Graduate School of Biomedical Science, Nagasaki University

我々はこれまで、FMO 計算プログラムの一つとして PAICS の開発を続けると共に、医学・薬学といった生命科学分野での応用研究を進めてきた。今回、最近の研究のうち、RI 法を用いた計算の高速化、QM/MM 法への拡張、プリオン病の薬剤開発への応用などに関して講演する。