

文部科学省

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト

# 次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発

## 第5回公開シンポジウム

ナノ統合拠点

文部科学省「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト（※1）  
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発（※2）

## 第5回公開シンポジウム

※1：以下、次世代スーパーコンピュータプロジェクト。

※2：以下、ナノ分野グランドチャレンジ研究開発。

主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト  
ナノ分野グランドチャレンジ研究開発 ナノ統合拠点

協賛：日本化学会、日本物理学会、化学工学会、高分子学会、応用物理学会、  
日本生物物理学会、分子科学会、溶液化学研究会、日本計算工学会、  
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、計算科学振興財団、  
計算物質科学イニシアティブ（CMSI）

日時：2011年2月22日(火) 11:00～18:00 および 懇親会  
2011年2月23日(水) 9:00～17:55

場所：甲南大学ポートアイランドキャンパス7F・レクチャーホール  
(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-20)

(交通アクセス：[http://www.konan-first.jp/map\\_a.html](http://www.konan-first.jp/map_a.html))

(ポートライナー三ノ宮駅から約14分、神戸空港駅から約5分、「ポートアイランド南  
駅」下車。下車後、南西方向へ、次世代スパコン施設前を歩いて隣接、徒歩3分。)

※会場周辺で昼食ができる場所が限られております。各自ご用意頂けますようお願い  
致します。

参加費：無料

懇親会：会費制 5,000円（2011年2月22日(火)18:20～19:50）

(兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-5)

(ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター1F レストラン)

(交通アクセス：[http://www.nichiigakkan.co.jp/kobe\\_pi/index.html#anchor04](http://www.nichiigakkan.co.jp/kobe_pi/index.html#anchor04))

※「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と合同懇親会

### 講演プログラム

(1日目) 2月22日(火) 11:00～18:00

11:00～12:00 次世代スーパーコンピュータ施設見学会

(希望者のみ(先着60名(web参加登録の際、要予約)))

※「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と合同セッション  
座長 岡崎 進(名古屋大学・大学院工学研究科・教授)

13:00～13:05 (分子科学研究所・教授/次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア  
の研究開発・ナノ統合拠点長)

平田 文男 開会の辞

13:05～13:10 (理化学研究所・次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究  
開発・プログラムディレクター)

茅 幸二 挨拶

13:10～13:15 (分子科学研究所・所長)

大峯 巖 挨拶

- 13:15-13:25 (総合科学技術会議・常勤議員)  
奥村 直樹 挨拶
- 13:25-13:30 (文部科学省大臣官房審議官 (研究振興局担当))  
戸渡 速志 挨拶
- 13:30-13:35 (理化学研究所・計算科学研究機構・機構長)  
平尾 公彦 挨拶
- 13:35-13:40 (理化学研究所・次世代スーパーコンピュータプロジェクト・  
プロジェクトリーダー)  
渡辺 貞 挨拶

13:40-13:55 休憩

座長 齊藤 真司 (分子研)

- 13:55-14:00 (分子研) 齊藤 真司 事務連絡
- 14:00-14:20 (分子研) 平田 文男 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発報告
- 14:20-14:35 (名大院工) 岡崎 進 プログラムの高度化
- 14:35-14:55 (分子研) 江原 正博 次世代ナノ統合ソフトウェア
- 14:55-15:15 (東大院理) 常行 真司 次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム  
(分野2 新物質・エネルギー創成)
- 15:15-15:25 (産応協議会) 高棹 滋 スーパーコンピューティング技術産業応用  
協議会報告

15:25-15:40 休憩

15:40-18:00 パネルディスカッション

2010年度テーマ：

「社会に役立つナノ統合ソフト 一次世代スパコンで、何か良い事を  
やっていただけなのですか？」

モデレータ	(分子研)	平田 文男
パネリスト	(物性科学) (東大院工)	押山 淳
	(物性科学) (京大基研)	遠山 貴巳
	(分子科学) (名大院工)	岡崎 進
	(分子科学) (分子研)	永瀬 茂
	(物性科学実験) (筑波大物理)	上殿 明良
	(分子科学実験) (神戸大院工)	近藤 昭彦
	(計算機科学) (筑波大計算セ)	佐藤 三久
	(スパコン開発) (富士通)	追永 勇次
	(企業研究者) (ダイセル)	柴田 徹

※「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と合同懇親会  
18:20~19:50 懇親会 (ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター1F レストラン)

(2日目) 2月23日(水) 9:00~17:55

座長 常行 真司 (東大院理)

9:00-9:30 (東大院工) 押山 淳 実空間第一原理ナノ物質シミュレータ  
(HP-RSDFT)  
9:30-10:00 (名大院工) 岡崎 進 高並列汎用分子動力学シミュレーション  
ソフト (Modylas)  
10:00-10:30 (京大基研) 遠山 貴巳 動的密度行列繰り込み群法  
10:30-10:50 休憩

座長 岡本 祐幸 (名大院理)

10:50-11:20 (分子研) 平田 文男 RISM / 3D-RISM  
11:20-11:50 (東大院工) 藤堂 眞治 大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)  
11:50-12:20 (分子研) 永瀬 茂、(産総研) 北浦 和夫  
高速量子化学計算ソフト

12:20-13:50 昼食

13:50-15:50 ポスターセッション  
(ポスターは前日からボードに貼り出し可能)

座長 遠山 貴巳 (京大基研)

15:50-16:10 (鳥取大工) 吉本 芳英 付加機能ソフトM2TDの紹介 (次世代ナノ複合  
材料)  
16:10-16:30 (名大院理) 岡本 祐幸 レプリカ交換法を実現する付加機能ソフト  
REM (次世代ナノ生体物質)  
16:30-16:50 (原子力機構) 前川 禎通 磁性半導体中の磁気相関 (次世代ナノ電子  
材料)

16:50-17:10 休憩

座長 北浦 和夫 (産総研)

17:10-17:30 (京大化研) 松林 伸幸 ermodの開発状況と環境調和型化学過程への  
適用事例 (次世代エネルギー)  
17:30-17:50 (阪大院理) 大橋 琢磨 クラスタ動的平均場理論を用いたプログラム  
開発と有限温度モット転移への応用 (次世代  
ナノ磁性材料)  
17:50-17:55 (分子研) 平田 文男 閉会の辞

※「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」は、  
「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と  
連携して公開シンポジウムを開催いたします。