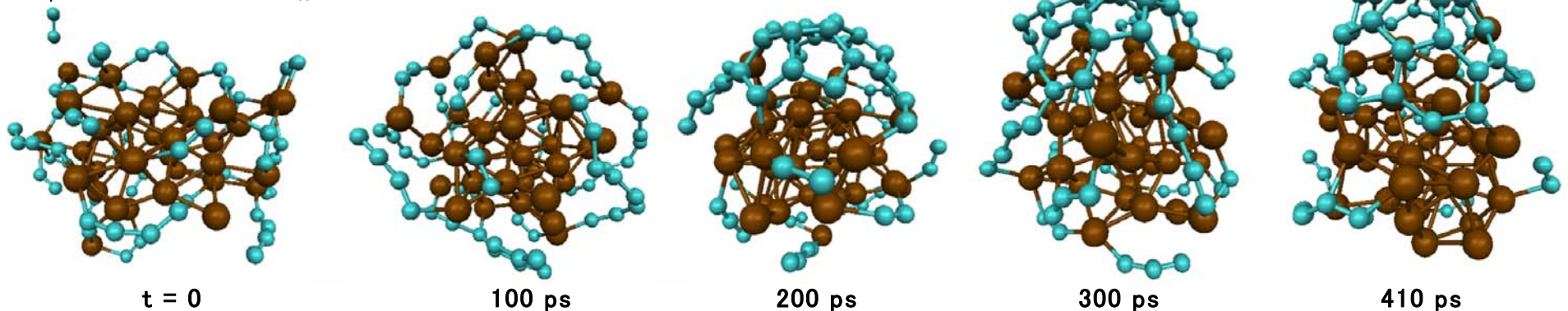


# 第2回大規模計算科学 国際シンポジウム

The 2nd International Symposium on Large-scale Computational Science and Engineering

Fe<sub>38</sub> ナノクラスター上での複数 C<sub>2</sub>分子からのナノチューブキャップの自己秩序形成  
Cap formation from 20 C<sub>2</sub>'s on Fe<sub>38</sub> cluster



2012年11月8日(木) 10:00~18:40 (開場 9:30)  
Nov. 8, 2012, Thursday

日本学術会議講堂 Science Council of Japan, Tokyo, Japan

参加費無料  
Admission Free

## ■会場のご案内■ ■ Venue & Access ■

### 日本学術会議講堂 Science Council of Japan

〒106-8555 東京都港区六本木 7-22-34  
7-22-34 Roppongi, Minato-Ku, Tokyo 106-8555, Japan

TEL : 03-3403-3793 (代表)

東京メトロ千代田線「乃木坂」駅5出口 徒歩3分

Tokyo Metro - Chiyoda Line (subway) "Nogizaka Station".  
Exit 5, 3 minutes walk



## ■参加申込み■ ■ Registration ■

下記 URL からお申し込みください。【締切: 11月1日(木)】  
【Deadline: Nov. 1, 2012】

<http://www.multi.jst.go.jp/intl-sympo2012/>

## ■お問い合わせ■ ■ Inquiry ■

独立行政法人 科学技術振興機構 担当 丹治

Secretariat: TANJI Akira  
Japan Science and Technology Agency

E-mail: [a2tanji@jst.go.jp](mailto:a2tanji@jst.go.jp)  
TEL: 03-3512-3526

主催  
Sponsor

 日本学術会議  
SCIENCE COUNCIL OF JAPAN

 独立行政法人  
科学技術振興機構  
Japan Science and Technology Agency

共催  
Co-sponsor

日本応用数理学会  
The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics  
日本化学会  
The Chemical Society of Japan  
日本機械学会  
The Japan Society of Mechanical Engineers  
日本計算工学会  
The Japan Society for Computational Engineering and Science  
日本計算数理工学会  
Japan Society for Computational Methods in Engineering  
日本計算力学連合  
JACM (Japan Association for Computational Mechanics)  
日本シミュレーション学会  
Japan Society for Simulation Technology  
日本物理学会  
The Physical Society of Japan

協賛  
Support

自動車技術会  
JSAE (Society of Automotive Engineers of Japan)

10:00~10:10	<p><b>開会挨拶 Opening Address</b></p> <p><b>シンポジウム議長挨拶 from the Symposium Chair</b>  <b>矢川 元基</b> (日本学術会議 東洋大学 教授)                      Genki YAGAWA (Science Council of Japan Professor, Toyo University, Japan)</p> <p><b>共催者代表挨拶 from the Co-sponsor Representative</b>  <b>市丸 修</b> ((独) 科学技術振興機構 戦略研究推進部 上席主任調査員)                      Osamu ICHIMARU (Senior Researcher, Department of Innovation Research, Japan Science and Technology Agency, Japan)</p>
10:10~11:45	<p><b>プレナリ講演 1 (ナノ) Plenary Lectures 1 (Nano)</b></p> <p>■司会 <b>戎崎 俊一</b> (理化学研究所 計算宇宙物理研究室 室長)                      Chair Toshikazu EBISUZAKI (Chief Scientist, RIKEN, Japan)</p> <p><b>有機金属分子と金属のナノ 接合：第一原理計算と実験の接点</b>                      Metal-Organic Molecule-Metal Nano-Junctions:                      A close contact between first-principle simulations and experiments</p> <p><b>人工分子ローターのシミュレーション</b>                      Simulations of Artificial Molecular Rotors</p> <p><b>ナノバイオ系のペタスケール分子動力学シミュレーション</b>                      Petascale molecular dynamics simulations of nano-bio-systems</p> <p><b>Mauro BOERO</b> (ストラスブルグ大学 材料物理化学研究所 教授)                      (Professor, Institut de Physique et Chimie des Matériaux, University of Strasbourg, France)</p> <p><b>Josef MICHL</b> (コロラド大学ボルダー校 教授)                      (Professor, University of Colorado at Boulder, USA)</p> <p><b>Aiichiro NAKANO</b> (南カリフォルニア大学 教授)                      (Professor, University of Southern California, USA)</p>
11:45~12:45	(昼休み) Lunch Break
12:45~14:20	<p><b>プレナリ講演 2 (バイオ) Plenary Lectures 2 (Bio)</b></p> <p>■司会 <b>岡本 祐幸</b> (名古屋大学 教授)                      Chair Yuko OKAMOTO (Professor, Nagoya University, Japan)</p> <p><b>ナノ・バイオシミュレーション – タンパク質動解析から DNA ナノ構造設計まで –</b>                      Simulation Based Nano-Bio Science &amp; Engineering: From Protein Dynamics to DNA Nanostructure Design</p> <p><b>ナノスケールマシンのシミュレーション：リボソームの大規模構造変化</b>                      Simulating nano-scale machines: Large-scale conformational changes of the ribosome</p> <p><b>生体系の大規模シミュレーション</b>                      Multiscale simulations of biological systems</p> <p><b>Moon Ki KIM</b> (成均館大学 准教授)                      (Associate Professor, Sungkyunkwan University, Korea)</p> <p><b>Karrisa SANBONMATSU</b> (ロスアラモス国立研究所 チームリーダー)                      (Team Leader, Los Alamos National Laboratory, USA)</p> <p><b>Weitao YANG</b> (デューク大学 教授)                      (Professor, Duke University, USA)</p>
14:20~14:40	(休憩) Break
14:40~15:45	<p><b>パネルディスカッションの前講演 (1) Pre-lectures for Panel Discussion (1)</b></p> <p>■司会 <b>佐藤 哲也</b> (兵庫県立大学 教授)                      Chair Tetsuya SATO (Professor, University of Hyogo, Japan)</p> <p><b>強相関電子物質のための第一原理予測</b>                      Ab initio prediction for strongly-correlated-electron materials</p> <p><b>ナノシステムの為のオーダーN 実空間 DFT と古典分子動力学とのハイブリッド化</b>                      Hybridization of order-N real-space-grid DFT and classical molecular dynamics for nano-systems</p> <p><b>精密予測と巨大分子設計の量子化学</b>                      Quantum Chemistry for Accurate Prediction and Giant-Molecular Design</p> <p><b>凝集反応系のマルチスケールシミュレーション</b>                      Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems</p> <p><b>今田 正俊</b> (東京大学大学院 教授)                      Masatoshi IMADA (Professor, University of Tokyo, Japan)</p> <p><b>尾形 修司</b> (名古屋工業大学大学院 教授)                      Shuji OGATA (Professor, Nagoya Institute of Technology, Japan)</p> <p><b>中辻 博</b> (量子化学研究協会 理事長)                      Hiroshi NAKATSUJI (Director, Quantum Chemistry Research Institute, Japan)</p> <p><b>長岡 正隆</b> (名古屋大学大学院 教授)                      Masataka NAGAOKA (Professor, Nagoya University, Japan)</p>
15:45~16:05	(休憩) Break
16:05~17:25	<p><b>パネルディスカッションの前講演 (2) Pre-lectures for Panel Discussion (2)</b></p> <p>■司会 <b>渡辺 貞</b> (理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 プロジェクトリーダー)                      Chair Tadashi WATANABE (Project Leader, RIKEN, Japan)</p> <p><b>ナノ・バイオ機能設計のための超高精度&amp;高効率量子化学演算法</b>                      Highly accurate and efficient quantum chemical method for nano-bio functional designs</p> <p><b>巨大バイオ分子集合体の構造ダイナミクス</b>                      Conformational dynamics of large biomolecular assemblies</p> <p><b>生体分子の反応のシミュレーション</b>                      Simulation of Biomolecular Reactions</p> <p><b>惑星間航行システム開発に向けたマルチスケール粒子シミュレーション</b>                      Multi-scale Plasma Particle Simulation for the Development of Interplanetary Flight System</p> <p><b>強い地震を受ける原子力発電プラントのペタスケールシミュレーション</b>                      Peta-scale Simulation of Nuclear Power Plant Subjected to Strong Earthquake</p> <p><b>青木 百合子</b> (九州大学大学院 教授)                      Yuriko AOKI (Professor, Kyushu University, Japan)</p> <p><b>北尾 彰朗</b> (東京大学 分子細胞生物学研究所 准教授)                      Akio KITAO (Associate Professor, University of Tokyo, Japan)</p> <p><b>諸熊 奎治</b> (京都大学 福井謙一記念研究センター リサーチリーダー)                      Keiji MOROKUMA (Research Leader, Kyoto University, Japan)</p> <p><b>臼井 英之</b> (神戸大学大学院 教授)                      Hideyuki USUI (Professor, Kobe University, Japan)</p> <p><b>吉村 忍</b> (日本学術会議 東京大学大学院 教授)                      Shinobu YOSHIMURA (Science Council of Japan Professor, University of Tokyo, Japan)</p>
17:25~17:35	(休憩) Break
17:35~18:35	<p><b>パネルディスカッション Panel Discussion</b></p> <p>■コーディネータ <b>矢川 元基</b>                      Coordinator Genki YAGAWA</p>
18:35~18:40	<p><b>閉会挨拶 Closing Address</b></p> <p><b>萩原 一郎</b> (日本学術会議 明治大学 先端数理科学インスティテュート副所長・教授)                      Ichiro HAGIWARA (Science Council of Japan Professor, Meiji University, Japan)</p>

※プログラムの内容は変更される場合があります。 \* The content of the program will be changed according to circumstances.