

## 第15回公開講演会

### プログラム

タイトル	「新汎用コンピュータの利用と次期スーパーコンピュータへの要望」
日時	平成11年3月11日(木)、12日(金)
場所	分子科学研究所電子計算機センター2階大会議室

3月11日(木)

13:30-14:00	「MCSCF+MP2法を用いたラジカル反応系の理論研究」	小関 史朗 (三重大工)
14:00-14:30	「分子シミュレーション - パソコン、MP1クラスター、専用計算機 -」	河村 雄行 (東工大院理工)
14:30-15:00	「並列版プログラムをどう開発するか」	西川 武志 (分子研理論)
15:00-15:15	<b>coffee break</b>	
15:15-16:00	「シリコングラフィックス社製Origin2000を利用したスケーラブルプログラミング」	戸室 隆彦 (日本シリコングラフィックス)
16:00-16:25	「スーパーコンピュータSX-5/4Bの概要と高速化技術」	木下 耕二 (NEC)
16:25-16:45	「SUPER-UXの機能強化の概要」	堀 健一 (NEC)
16:45-17:30	「SX-5のプログラミング言語とツールの概要」	藤井 等 (NEC)
18:00-20:00	懇親会	

3月12日(金)

9:30-10:00	「北欧のフリーソフトDALTONの紹介と応用事例」	望月 祐志 (科技団・原研)
10:00-10:30	「振動スペクトルの理論的解析における諸問題と今後の展望」	鳥居 肇 (東大院理)
10:30-11:00	「分子軌道計算による化学反応の経路と相互作用」	笛野 博之 (京大院工)
11:00-11:15	<b>coffee break</b>	
11:15-11:45	「遷移金属化学種の構造・電子状態・反応挙動に関する理論的研究」	杉本 学 (熊本大工)
11:45-12:15	「密度汎関数法による半無限結晶表面の電子状態計算」	石田 浩 (日大文理)
12:15-13:30	昼食	
13:30-14:00	「Multicanonical algorithm in Ab initio simulation - investigation of structure and spectroscopy of clusters -」	Pradipta Bandyopadhyay (分子研理論)
14:00-14:30	「タンパク質全電子計算とスーパーコンピュータ」	佐藤 文俊 (九工大情報工)
14:30-15:00	「蛋白質の分子動力学シミュレーション：その精度と計算効率の改善」	木寺 詔紀 (京大院理)