

平成14年度スーパーコンピュータワークショップ

2003年のスーパーコンピュータワークショップを、平成15年3月11日（火）、12日（水）に開催いたしました。

タイトル	「実験家は計算科学に何を期待するか」
日時	平成15年3月11日（火）～3月12日（水）
場所	計算科学研究センター2階大会議室 場所： 広域地図 、 所内地図 （講演会場：④、懇親会会場：⑫）

本年度は、実験研究の最前線で活躍されている研究者を招き、その研究紹介とともに「このような計算がやれたら自分の研究（TX-7、TX-7）についての実践的な活用方法等の講習も行いました。質問・お問い合わせは、[電子メール](#)でお問い合わせ下さい。

以下より、メーカー資料をダウンロードできます。

- [NECのHPCへの取り組み（1.6MB）](#)
- [SX-7～ハードウェア紹介資料～（990KB）](#)
- [TX-7/i9x10,i6010～ハードウェア紹介～（2.1MB）](#)
- [SX-7 プログラムチューニング（111KB）](#)
- [TX-7 プログラムチューニング（131KB）](#)

「実験家は計算科学に何を期待するか？」

現在、物質科学や生物科学の分野で新しいフロンティアの開拓が始まっています。その代表的なものがポストゲノムであり、したり、あるいは物質を設計したりすることが困難になりつつあります。最近、多くの実験家がこれまでにない大きな期待を

一方、このような生物科学、ナノ科学、あるいは溶液内化学反応の問題は計算科学にとっても極めてチャレンジングな問題でしていません。したがって、このような方法論を確立することこそ、新世紀の計算科学に課せられた最も重要な課題のひとつ

現在、計算機性能の飛躍的向上および理論分子科学・計算科学の発展によって、これまで取り扱いが不可能であった複雑系や

本ワークショップではナノサイエンスやバイオサイエンスを含む様々な分野の実験研究の最前線にある研究者をお招きし、その研

－ 講演プログラム －

3月11日（火）

座長：南部伸考		
13:00-13:10	Open Remark	平田 文男（計算科学セ）
13:10-13:40	「遷移金属および希土類を含む有機金属錯体の電子構造」	渡辺 幸之助 （ 理研 ）
13:40-14:20	「電子回折法による強光子場中の分子運動」	田嶋 賢之助 （東大院理）
14:20-15:00	「ナノ空間制約分子系に見る新展開」	金子 克美 （千葉大理）

15:00-15:40	「有機単分子膜で保護されたサブナノ金属薄板分子膜の構造と安定性」	
15:40-16:00	Coffee Break	
座 長： 佃 達哉		
16:00-16:40	「固液界面に形成される吸着層の構造」	板谷 謹吾（東北大院工）
16:40-17:20	「金属錯体による水分子の活性化」	田中 晃二（分子研）
17:20-18:00	「RLi 化学種の溶液中の構造と速度論」	山高 博（阪大産研）
18:30-20:00	懇親会	（職員会館）

3月12日（水）

座 長： 高見 利也		
9:30-12:30	新汎用高速演算機システムについて 「SX-7ハードウェアの紹介」 「TX7/i9501ハードウェアの紹介」 「SX-7プログラムチューニング」 「TX7/i9501プログラムチューニング」	萩原 孝（日本電気） 渋谷 俊輝（日本電気） 横谷 雄司（日本電気） 左近 彰一（日本電気）
12:30-13:30	昼食	
座 長： 山高 博		
13:30-14:10	「表面赤外振動分光データやナノバイオ物理・化学解析に必要な計算機シミュレーション」	宇理 須恒（理研）
14:10-14:50	「アルケン類を活用する精密合成反応の設計と開発」	正岡 隆（東大院理）
14:50-15:30	「実験と計算による時間分解蛋白質ダイナミクスの解明」	寺嶋 亓秀（理研）
15:30-15:40	Coffee Break	
座 長： 三浦 伸一		
15:40-16:20	「副作用のないハイブリッドリポソームの構築」	松本 陽治（崇城大院工）
16:20-17:00	「液液界面における特異的錯形成反応」	渡會 仁（阪大院理）
17:00-17:10	End Remark	岡崎 進（計算科学セ）