

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 | coffee break | |
| 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 | coffee break | |
| 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) |