

平成12年度(第1回)スーパーコンピュータワークショップ

日付	平成13年3月22日(木)～3月23日(金)
場所	計算科学研究センター2階大会議室

講演で使用したメーカー講習会資料のPDFファイルをダウンロードできます。

- [富士通\(69KB\)](#)
- [日本SGI\(1,268KB\)](#)
- [日本電気\(333KB\)](#)

3月22日(木)

13:25-13:30	Open remark	平田文男(計算科学センター)
座長 : 南部 伸孝		
13:30-14:00	「有機金属会合種の反応における協同効果に関する理論的研究」	山中正浩(東大理)
14:00-14:30	「C60超伝体の電子構造」	梅本幸一郎(東工大理工)
14:30-15:00	「分子磁性体の ab initio 計算」	鷹野 優(大阪大理)
15:00-15:30	「4成分相対論的電子状態理論の開発」	柳井 毅(東大工)
15:30-15:45	(coffee break)	
座長 : 高見利也		
15:45-16:45	「HPF言語と今後のプログラミングインタフェース」	妹尾義樹(日本電気)
16:45-17:45	「OpenMPプログラミング・ワークショップ」	芦澤芳夫(日本SGI)
17:45-18:00	「新年度の申請について」	青柳 睦(計算科学センター)
18:30-20:30	懇親会	

3月23日(金)

座長 : 片岡洋右		
9:30-10:00	「蛋白質ナノチューブの第一原理電子論」	武田京三郎(早大理工)
10:00-10:30	「密度汎関数法プログラム ProteinDF を用いた並列処理によるシトクロム c の全電子計算」	佐藤文俊(九工大情報工)
10:30-11:00	「機能を生み出す蛋白質のダイナミクス」	北尾彰朗(京大理)
11:00-11:15	(coffee break)	
座長 : 森田明弘		
11:15-11:45	「星間空間における分子生成反応の理論的研究」	長村吉洋(立教大理)
11:45-12:15	「シルセスキオキサンの分子軌道法計算による研究」	工藤貴子(群馬大工)
12:15-13:30	(昼食)	
座長 : 青柳 睦		
13:30-14:15	「VPP Fortranの設計思想と特徴」	山中栄次(富士通)
14:15-15:00	「プログラミングに関するVPP利用技術について」	村瀬丈夫(富士通)
15:00-15:10	(休憩)	
座長 : 北尾彰朗		
15:10-15:40	「過飽和蒸気相における均質核形成の自由エネルギー」	片岡洋右(法政大工)
15:40-16:10	「気液界面の構造に対するsum frequency generationスペクトルの非経験的理論解析」	森田明弘(京大院理)
16:10-16:40	「定圧第一原理分子動力学法でのSi結晶構造の安定性とk点サンプリング数との関係」	田代順一(慶応大理工)
16:40-17:10	「バクテリア Proteus mirabilis のパターン形成シミュレーション」	橋本昌人(分子研)
17:10-17:15	End remark	青柳 睦(計算科学センター)