

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 ーパソコン、MPIクラスター、専用計算機ー」	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」	詔紀（京大院理）

