

## 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」 | 山本正樹（東大理）      |
| 14:00-14:30 | 「C60超伝導体の電子構造」                | 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」                               | 藤寛子（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」                                | 木瀬 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」                           | 田中 洋介（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結晶構造の安定化」                          | 藤田 大輝（京大院理）    |
| 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） |

このページに関する質問・要望等は、[計算科学研究センター](#)までメールしてください。