

## 第12回公開講演会

### プログラム

タイトル	並列計算等次期汎用計算プログラムとそのパラレル化の試み
日時	平成6年11月24日（木）～25日（金）

11月24日（木）

13:30-13:40	開 会	(分子研センター長)
(座長：小原 繁)		
13:40-14:40	「C++による巨大分子の密度汎関数計算プログラムとそのパラレル化の試み」	佐藤 文俊 (九工大・情報工)
14:40-15:40	「メッセージ通信による密度汎関数法プログラムの並列化」	林 秀光 (豊田中研・数理情報)
15:40-16:00	コーヒープレイク	
(座長：長村 吉洋)		
16:00-17:00	「Super Direct CI」	W. Duch (Nicholas Copernicus Univ., Poland)
17:00-18:00	「Parallel Computing In Chemistry Made Easier」	R. J. Harrison (Battelle Pacific North west Lab.)
18:00-18:30	「新計算機システムの紹介」	青柳 睦 (分子研電算センター)
18:30-20:30	懇 親 会	

11月25日（金）

(座長：相田 美砂子)		
9:30-10:30	「並列版HONDOの紹介」	M. Dupuis (IBM Coperation, Kingdon)
10:30-11:30	「並列計算機IBM SP1の使用経験」 ～HONDO, 3次元格子上のMO作成～	村上 明德 (三菱化学・横浜総研)
11:30-13:00	昼 食	
(座長：三好 永作)		
13:00-14:00	「ハイパフォーマンスコンピューティングの発展と電算技術動向」	
14:00-15:00	「非経験的分子軌道計算のパラレル処理」	望月 裕志 (NEC基礎研) 平原 幸男 (NEC情報システムズ)

15:00-16:00	「サーバ・クライアント方式による行列対角化パッケージ REISPACKの開発」	足立 聡（東工大・理）
16:00-16:10	閉 会	（分子研センター長）