

## 平成15年度スーパーコンピュータワークショップ

第4回スーパーコンピュータワークショップを、平成16年3月4日（木）、5日（金）に開催しました。

タイトル	「大規模・高精度電子状態計算に向けて」
日 時	平成16年3月4日（木）～3月5日（金）
場 所	岡崎コンファレンスセンター、 <a href="#">地図</a>

今回は、主に電子状態計算の分野でご活躍の方々を講演者をお呼びし、IntelやNECのメーカーの講習会も行いました。問い合わせ・質問等は、[ワークショップ担当](#)宛てにご連絡ください。

以下より、メーカー及びセンターの講習会資料がダウンロードできます。

### 【Intel】

- ハイパフォーマンスコンピューティングテクノロジーへの挑戦 (5.1MB)
- Intel Itanium 2 プロセッサのプログラミング手法 (363KB)

### 【NEC】

- NEC HPC製品のご紹介 SX-7シリーズ、TX-7シリーズ、PCクラスタ (4.2MB)
- Performance Optimization and Tuning for NEC TX7  
(including MOLPRO, MOLCAS, AMBER, GAMESS-US) (1.6MB)

### 【センター】

- 新しい運用について (40KB)
- Gaussian03/98の効率的な利用について (677KB)

### 「大規模・高精度電子状態計算に向けて」

化学の分野で研究する上で、最近のPCクラスターの普及は、高速な電子状態計算を可能にしてきている。しかし電子状態計算科学研究センターでは、ここ数年の間、PCクラスターでは実行が困難な電子状態計算を、いかに実現可能にするかについて、今後電子状態計算の分野において、どのような計算が可能、または必要になるか、将来展望・センターへの要望等を

### － 講演プログラム －

3月4日（木）

座長：森田 明弘		
13:00-13:10	Opening remarks	永瀬 茂（計算センター）
13:10-14:10	「Second Order Møller-Plesset Energies for Large Molecules」	Peter Pulay (Arkansas Univ.)

14:10-15:10	「タンパク質の電子状態計算」	北浦和夫（産総研）
15:10-15:30	Coffee break	
座長：南部伸孝		
15:30-17:30	Intel 講習会 「インテル・アキテクチャとHPCへの懇親会 「インテル・コンパイラを用いた最適化の手法」	
17:30-17:50	「新しい運用について」	水谷文保（計算センター）
17:50-18:20	「Gaussian03の効率的な実行について」	南野智（計算センター）
18:30-20:00	懇親会	（コンファレンスセンター中会議室）

3月5日（金）

座長：高見利也		
9:00-11:00	NEC 講習会 「IPFの高度なチューニングに関して ～AMBER, GAMESS, MOLPRO, MOLCASのチューニング方法及び内容～」	増田典雄、A. Amin、J. Fredin（NEC（株））
11:00-12:00	「金属錯体を含む複合分子の電子状態計算本学（熊大院自然）	
12:00-13:30	昼食	
座長：三浦伸一		
13:30-14:30	「大規模・高精度電子状態計算から何がわかる（理系）」	アプローチ
14:30-15:30	「密度汎関数法によるナノ・バイオ物質の構造と性質」	（理系）
15:30-16:30	「相対論的分子理論の最近の展開」	中嶋隆人（東大院工）
16:30-16:35	Closing remarks	岡崎進（計算センター）

このページに関する質問要望は、計算科学研究センターまでお問い合わせ下さい。