

## 第13回公開講演会

### プログラム

日時	平成8年11月5日(火)～6日(水)
場所	分子科学研究所電子計算機センター2階大会議室

11月5日(火)

13:00-13:20	受付	
13:20-13:30	開会	
13:30-14:00	「結晶構造変化を許した第一原理分子動力学法によるシリコン結晶の計算」	岩田 未廣 (分子研)
14:00-14:30	「ワークステーション環境で育った利用者から次期スーパーコンピュータに望むこと」	森下 徹也 (慶応大理工)
14:30-15:00	「液体の構造とラマンnoncoincidence効果」	鳥居 肇 (東大理)
15:00-15:15	コーヒーブレイク	
15:15-15:45	「超臨界溶液の分子動力学シミュレーション」	片岡 洋右 (法政大工)
15:45-16:15	「水の非線形分光とダイナミクスの理論解析」	斉藤 真司 (名大理)
16:15-16:45	「メッセージ交換型プログラムとプログラミング規範」	寒川 光 (日本IBM)
16:45-17:15	「SX-4上の並列処理の紹介」	藤井 等 (NEC)
17:15-18:15	討論会 「次期スーパーコンピュータに向けて」-「計算分子科学」の今後の展望と電算センターの計算機に対する期待・要望-	
18:30-20:00	懇親会	

11月6日(水)

9:00-9:30	「ab initio MO計算を用いたモンテカルロシミュレーション」	麻田 俊雄 (大阪府大総合科学)
9:30-10:00	「タンパク質の全電子計算を目指した密度汎関数法プログラムの開発とその現状」	佐藤 文俊 (九工大情報工)
10:00-10:30	「最適化と蛋白質の立体構造予測シミュレーション」	岡本 裕幸 (分子研理論)
10:30-10:45	コーヒーブレイク	
10:45-11:15	「SAC-CI法の大規模分子への展開と光合成反応中心の励起状態への応用」	波田 雅彦 (京大工) 長谷川 淳也 (京大工)
11:15-11:45	「組み替え反応 $O + HCl \rightarrow OH + Cl$ の量子動力学計算」	信定 克行 (分子研理論)
11:45-12:15	「並列版Gaussian + Lindaの導入とベンチマーク」	茂木 孝一 (分子研センター)
12:15-13:25	閉会	岩田 未廣 (分子研)