

平成16年度スーパーコンピュータワークショップ

|     |                          |                         |
|-----|--------------------------|-------------------------|
| 日時  | 2005年3月7日（月） - 8日（火）     |                         |
| 場所  | セミナー — 岡崎コンファレンスセンター小会議室 | 懇親会 — 岡崎コンファレンスセンター中会議室 |
| テーマ | 「次期スパコン構想と今後の大規模分子計算」    |                         |

3月7日（月）

|               |                                   |                  |
|---------------|-----------------------------------|------------------|
| 1 : 00-1 : 10 | はじめに                              | 中村宏樹（分子研所長）      |
| 座長 岡崎         |                                   |                  |
| 1 : 10-2 : 10 | HPCとグリッド・コンピューティングの将来             | 松岡聡（東工大）         |
| 2 : 10-3 : 10 | 次期地球シミュレータと最先端HPCの動向              | 佐藤哲也（JAMSTEC）    |
| 3 : 10-3 : 30 | 休憩                                |                  |
| 座長 南部         |                                   |                  |
| 3 : 30-4 : 00 | グリッド環境を使ったナノ分野におけるリアルタイム・コラボレーション | 平田文男（分子研）        |
| 4 : 00-4 : 30 | 量子化学計算の高速化及び並列化                   | 石村和也・永瀬茂（分子研）    |
| 4 : 30-5 : 00 | 超大規模MDシミュレーション                    | 吉井範行・岡崎進（計算センター） |
| 5 : 00-5 : 30 | 新炭素材料と大規模物性計算                     | 岡田晋（筑波大）         |
| 6 : 00-8 : 00 | 懇親会                               |                  |

3月8日（火）

|                 |                                  |              |
|-----------------|----------------------------------|--------------|
| 9 : 00-9 : 20   | 新システムでの大型計算プロジェクト                | 森田明弘（計算センター） |
| 座長 三浦           |                                  |              |
| 9 : 20-9 : 50   | 遷移金属元素を含む複合電子系の構造と反応の理論的研究       | 榊茂好（京大）      |
| 9 : 50-10 : 20  | 金属 - 芳香族有機分子からなるサンドイッチクラスターの理論研究 | 藪下聡（慶大）      |
| 10 : 20-10 : 50 | 第一原理分子動力学計算によるポリアモルフィズムの研究       | 森下徹也（産総研）    |
| 10 : 50-11 : 10 | 休憩                               |              |
| 座長 石田           |                                  |              |
| 11 : 10-11 : 40 | ロドプシン光受容タンパク質の光化学反応動力学           | 林重彦（京大）      |
| 11 : 40-12 : 10 | 液体の運動と多次元振動分光法                   | 斎藤真司（名大）     |
| 12 : 10-12 : 40 | スーパーコンピュータによる生体超分子系のシミュレーション     | 北尾彰朗（東大）     |
| 12 : 40-12 : 50 | おわりに                             | 永瀬茂（センター長）   |