

## 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、地図     |

今回は、主に電子状態計算の分野でご活躍の方々に講演者をお呼びし、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](#)にてご連絡ください。

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の重要性が高まるとともに、より大規模で、かつ高精度な電子状態計算を、より高速に実行したいという研究者のニーズはますます大きくなってきている。計算科学研究センターでは、ここ数年の間、PCクラスタ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議論を深めてきた。また、それを実現するにあたって、来年度からは運用等の大幅な見直しを図り、いままでいろいろな制約があって利用が難しかった、大規模・長時間ジョブについて計算可能な環境を整備する予定である。そこで、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含め、本ワークショップで討論していただきたい。

### - 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<br>「インテル・アキテクチャとHPCへの取り組み」<br>「インテル・コンパイラを用いた最適化の手法」 | 池井 満（インテル（株））                |
| 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）                 |

|                    |     |                   |
|--------------------|-----|-------------------|
| <b>18:30-20:00</b> | 懇親会 | (コンファレンスセンター中会議室) |
|--------------------|-----|-------------------|

3月5日(金)

|                    |   |                                  |
|--------------------|---|----------------------------------|
| <b>座長：高見 利也</b>    |   |                                  |
| <b>9:00-11:00</b>  | <b>NEC 講習会</b><br>「IPFの高度なチューニングに関して<br>～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)) |
| <b>11:00-12:00</b> | 「金属錯体を含む複合分子の電子状態計算」  | 杉本 学 (熊大院自然)                     |
| <b>12:00-13:30</b> | 昼食  |                                  |
| <b>座長：三浦 伸一</b>    |   |                                  |
| <b>13:30-14:30</b> | 「大規模・高精度電子状態計算から何がわかるか - EDAによるアプローチ」   | 中井浩巳 (早大理工)                      |
| <b>14:30-15:30</b> | 「密度汎関数法によるナノ・バイオ物質での新現象」  | 押山 淳 (筑波大物理)                     |
| <b>15:30-16:30</b> | 「相対論的分子理論の最近の展開」  | 中嶋隆人 (東大院工)                      |
| <b>16:30-16:35</b> | 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。