

## 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 「インテル・アキテクチャとHPCへの取り組み」 「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）

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」	杉本 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か - EDAによるアプローチ」	中井浩巳 (早大理工)
14:30-15:30	「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)
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。