



北海道大学
HOKKAIDO UNIVERSITY



産総研
National Institute of
Advanced Industrial Science
and Technology
AIST
独立行政法人産業技術総合研究所

北大—産総研 包括連携等事業ワークショップ
～OCTA/COGNAC 並列化版利活用ワークショップ～

趣旨：北海道大学情報基盤センターでは、昨年度より OCTA/COGNAC について、スーパーコンピュータ HITACHI SR11000/K1 の上で並列化されたプログラムを提供しています。本年 11 月には、スーパーコンピュータが最新機種である HITACHI SR16000/M1 に更新され、さらに SMP における並列化度を 2 倍に上げた計算が行える環境になりました。一方で、産総研では、OCTA の BBS サーバを公開しており、OCTA の利用促進に努めています。本ワークショップでは、並列化版 OCTA/COGNAC について、従来からの COGNAC のユーザをはじめとした産学官の研究者の方々に広く情報提供することを目的とした場として開催いたします。専門の方々に講師にお招きし、粗視化 MD 法を用いたシミュレーション及び並列化 COGNAC の利用について、議論を行います。奮ってご参加いただけますようお願いします。

日 時： 2012 年 1 月 18 日(水) 13:00～17:00、19 日(木) 10:00～17:10
場 所： 北海道大学 東京オフィス 会議室
東京都千代田区丸の内 1 丁目 7-12 サピアタワー 10 階
<http://www.hokudai.ac.jp/bureau/news/news-top/toffice/index.html>
申 込： メールで下記までお申込みください。2012 年 1 月 15 日(日) 締切
hokudai-aist-ws2012@m.aist.go.jp
定 員： 25 名程度
参加費： 無料

プログラム

1 / 18 主題:粗視化MD法の可能性を探る

13:00-13:10	開会のご挨拶		
13:10-14:10	粗視化分子動力学法と OCTA/COGNAC の概要	(旭化成)	青柳 岳司
14:10-15:10	J-OCTA を用いた粗視化 MD の適用事例	(JSOL)	小沢 拓
	休憩 (20 分)		
15:00-16:00	COGNAC を用いた高分子材料シミュレーションと今後の展開	(産総研)	森田 裕史
16:00-17:00	高分子結晶化と大規模計算への期待	(山口大)	山本 隆

1 / 19 主題：大規模MDシミュレーションの可能性を探る

- 10:00-11:00 北海道大学情報基盤センター学際大規模計算機システムの紹介
(北大) 大宮 学
- 11:00-12:00 OCTA/COGNAC の SMP 並列化と更なる大規模計算にむけて
(防衛大) 萩田 克美
- 昼食(75分)
- 13:15-13:45 北大センターを活用したフィラー充填ゴムの粗視化 MD 解析の事例
(トヨタテクニカルイノベーション) 佐藤 正俊
- 13:45-14:15 直鎖アルカンの構造形成および融解過程の分子動力学シミュレーション
(京都工繊大) 藤原 進
- 14:15-14:45 ゴム複合材料の大規模粗視化分子動力学シミュレーション
(三ツ星ベルト) 柳生 裕聖
- 休憩(30分)
- 15:15-15:45 AVS/Express を用いた COGNAC 大規模可視化
(サイバネットシステム) 黒木 勇
- 15:45-16:15 RCM(R&D chain management) を用いたパラメータスタディの効率化
(キャトルアイサイエンス) 上島 豊
- 16:15-17:00 並列化 COGNAC 利用に関する質問
- 17:00-17:10 閉会の挨拶

問い合わせ先

北海道大学 情報基盤センター 教授 大宮 学

(独)産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 主任研究員 森田裕史

連絡先メールアドレス : hokudai-aist-ws2012@m.aist.go.jp