



北海道大学
HOKKAIDO UNIVERSITY



北大―産総研 包括連携等事業ワークショップ
～”大規模”シミュレーションの“連携”について考える～

趣旨：北海道大学情報基盤センターでは、数年前より OCTA/COGNAC について、当時のスーパーコンピュータ HITACHI SR11000/K1 の上で SMP 並列化されたプログラムを提供してきました。また、平成 23 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。近年は、OCTA/COGNAC の並列化版だけでなく、大規模計算というキーワードに加えて、様々なシミュレータにもニーズが出てきております。

そこで本年のワークショップでは、昨年度の並列化版 OCTA/COGNAC を基にしたテーマから一歩進み、“大規模シミュレーション”と“シミュレーションの連携”の 2 つをテーマとして、開催いたします。これらのテーマに関係する専門の方々を講師としてお招きし、大規模シミュレーションの利用についてまで議論を行う予定です。奮ってご参加いただけますようお願いいたします。

日時： 2013 年 1 月 21 日(月)

場所： (独)産業技術総合研究所 臨海副都心センター 本館 第 1 会議室
<http://unit.aist.go.jp/waterfront/access/>

申込： メールで下記の情報を記載の上、お申込みください。 **1 月 16 日締切**

お名前・御所属・メールアドレス

(当日受付は致しかねますので、ご注意ください)

受付先アドレス： hokudai-aist-ws-ml@aist.go.jp

定員： 50 名

参加費： 無料

プログラム

10:30-10:40 開会のご挨拶

10:40-11:40 COGNAC と SUSHI の連携と SUSHI の大規模シミュレーション

(日本ゼオン)

本田 隆

11:40-12:10 OCTA/COGNAC 初心者への LAMMPS の利用の早わかり

(防衛大)

萩田 克美

12:10-12:30 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

休憩(60 分)

- 13:30-14:00 フリー版 COGNAC の並列化と他 MD プログラムとの連携
(旭化成) 青柳 岳司
- 14:00-14:30 OCTA エンジンと外部ソフトウェアの連携・インターフェイス
(JSOL) 小沢 拓
- 14:30-15:30 大規模粗視化分子シミュレーションによる両親媒性分子の自己組織化構造の解析
(産総研) 篠田 渉
- 15:30-16:00 分子動力学によるゴム粘弾性計算
(東洋ゴム) 日野 理
- 16:00-16:30 OCTA・大規模計算・シミュレーション連携に関するディスカッション
- 16:30-16:40 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-ws-ml@aist.go.jp