

# 高分子系粗視化シミュレーション基盤の 計算機科学的な高度化検討

防衛大学校 応用物理学科 萩田 克美

**目的** 高分子複合材料に関連した粗視化シミュレーション技法の計算結果に関する探索的な可視化について検討した。

**内容** 阪大HOPE(没入型可視化装置)を用いて、高分子複合材料系のやや複雑な3次元立体構造の概観を探索的に観察する仕組みを確立し、有効性や性能を評価した。

**結果** OCTA/cognac・sushiなどの粗視化シミュレーションや、散乱の逆空間データからの逆モンテカルロ法やオーバーサンプリング法などから得られる3次元構造についてHOPEで探索可視化を行い、観察を行った。また、JASRIと共に「SPring-8利用推進協議会ヘルスケア研究会(第13回)」で参加者に、HOPEでの立体認知の有効性を体感していただいた。(右)3次元構造推定像、(左)OCTA/sushi

