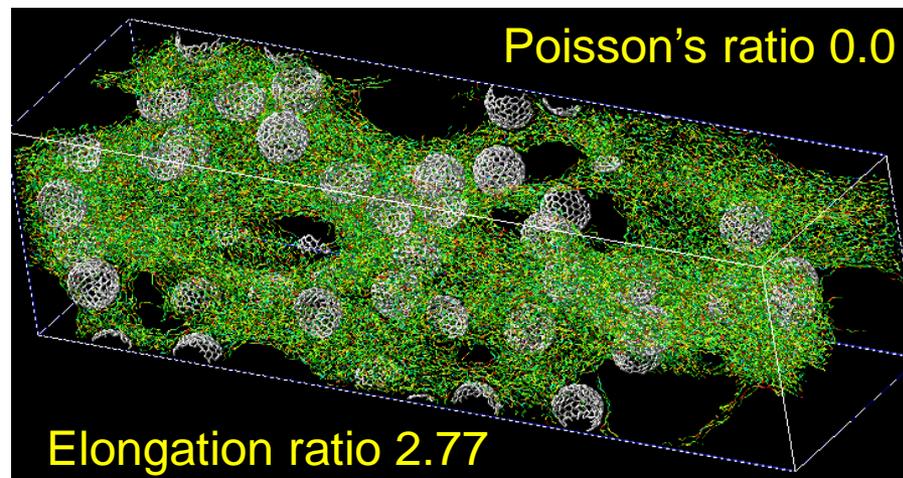


# 粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション 基盤の計算機科学的高度化検討

防衛大学校 応用物理学科 萩田 克美

- 目的** 粗視化分子動力学法を用いた高分子材料の大規模シミュレーション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、高分子材料の粗視化MD模型が示す「複雑な立体な概観」から「分子鎖レベルの詳細」までを探索的に観察する仕組みを確立し、性能を評価した。
- 結果** 現在導入されているシステムとミドルウェアの性能において、最大限効果的な没入型可視化を実現できる範囲を明らかにした。加えて、可視化ミドルウェアの改良提案に資する情報を得た。  
(右図の規模の可視化が可能。)



図： 延伸した高分子ナノコンポジット