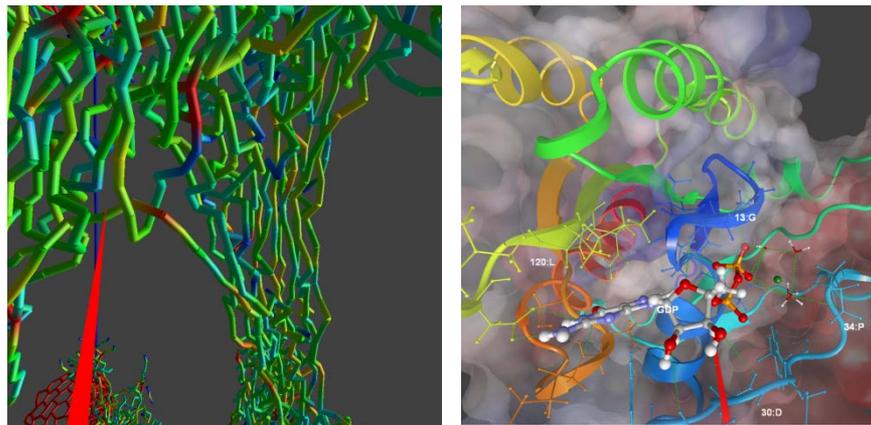


粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション 基盤の計算機科学的高度化検討

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、有効性や性能を評価した。
- 結果** バーチャルデジカメ(仮称)として、HOPE内の観察者が実際に見ている画像を記録する仕組みを作り、臨場感の高い画像が得られることを確かめた。また、HOPE内で観察者自身が、細かい数値操作などを可能とする仕組みをiPad2で構築し、その有効性を確かめた。(これまで、細かい数値操作のために補助者が必要であった。)



図： バーチャルデジカメで撮影した画像