

14-NA22

村島 隆浩 (東北大学大学院理学研究科)

高分子流体計算の並列効率向上と3D可視化



課題参加メンバー: 江川隆輔(東北大)、萩田克美(防衛大)、戸田昌利(産総研)

Macroscopic level **Multiscale Phenomena**

Vortex growth

Weissenberg effect

Die swell

Boger & Walters (1993)
"Rheological Phenomena in Focus"

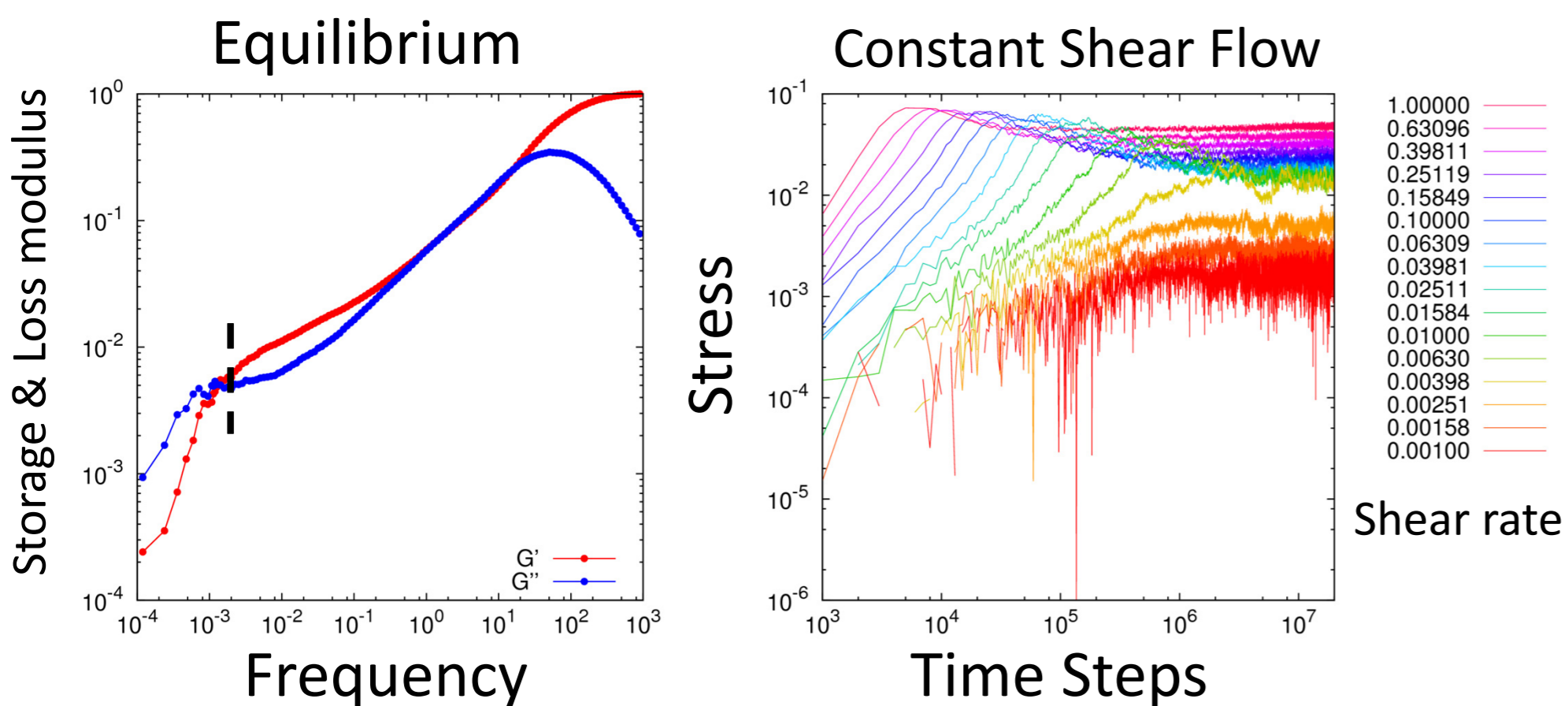
Microscopic level

Multiscale simulation

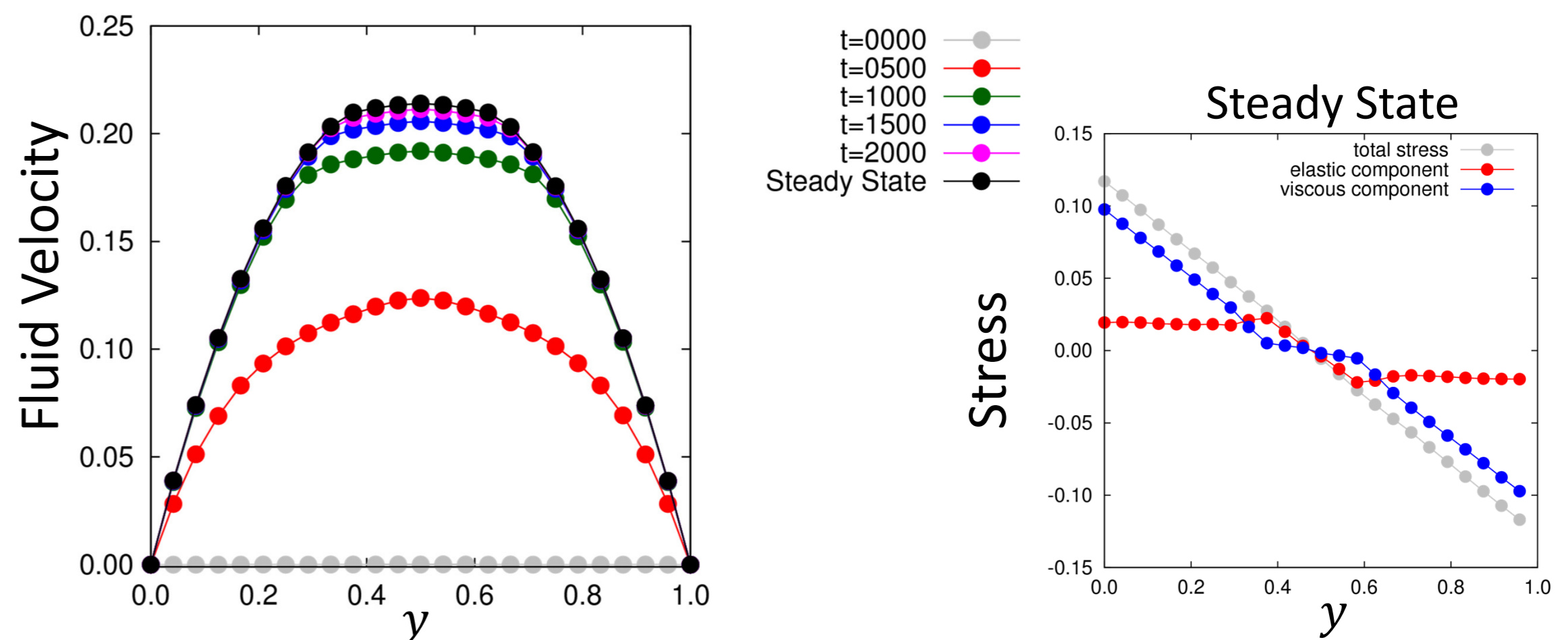
•TM, T. Taniguchi, EPL, **96**, 18002 (2011)
•TM, S. Yasuda, T. Taniguchi, R. Yamamoto, JPSJ, **82** 012001 (2013)
•TM, M. Toda, T. Kawakatsu, AIP Conf. Proc., **1518**, 436 (2013)

Fluid dynamics **Coarse-grained MD (Wormlike Micellar Solution)**

Single-scale results



Multi-scale results



Multiscale Simulation可視化の課題

分子スケールの可視化を行いたいが大規模なために時系列データを保存し、解析することが困難

シミュレーション実行中のデータにアクセスし、解析が行えれば必要なデータのみ取り出すことが可能

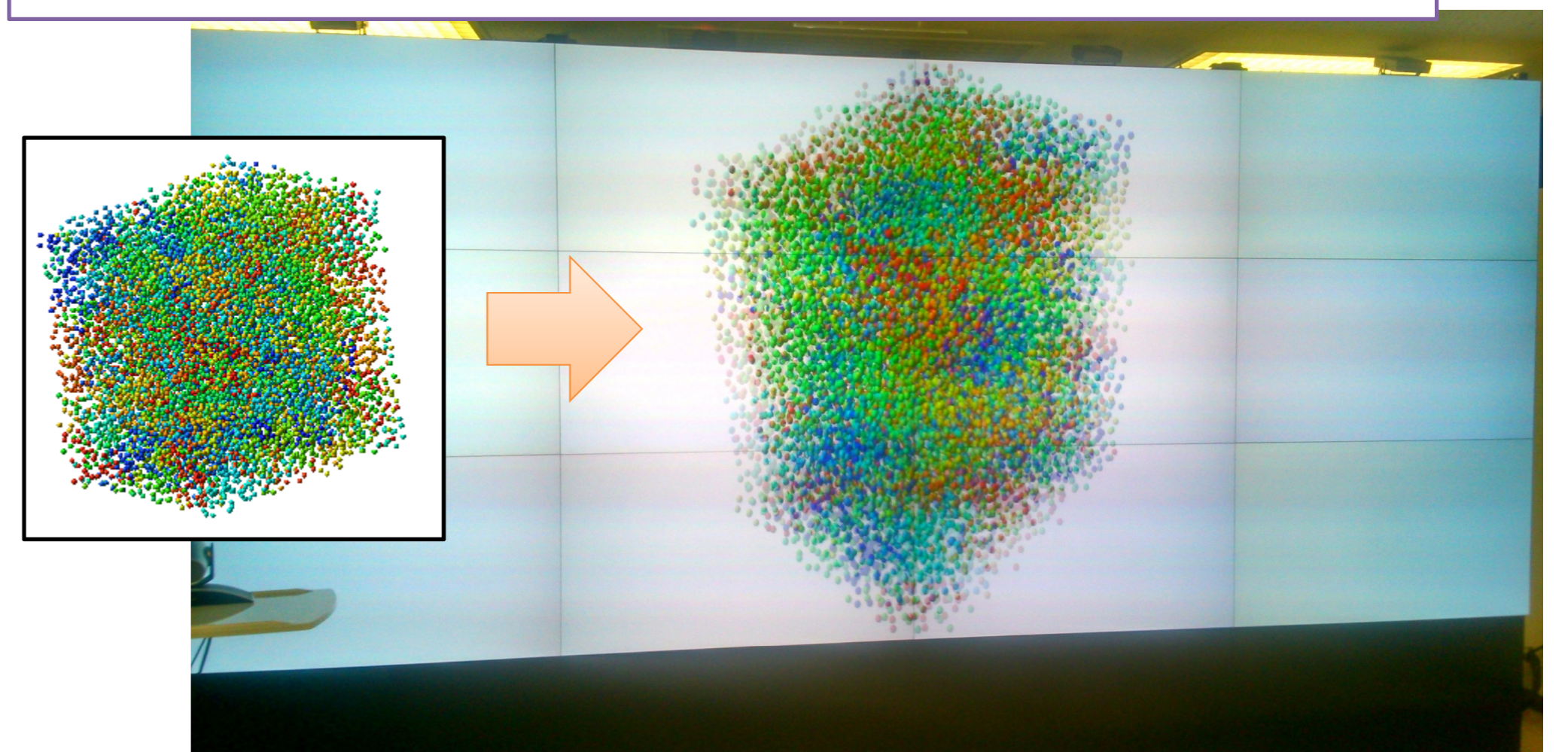
- Interactiveな命令実装による双方向データアクセス
- タイルディスプレイ表示による全体把握と3D立体視による直観的な空間把握

Interactive MD

LAMMPS, VMDの連携によるInteractive MDの事例

- 重力下の粒子(単一粒子とC60型の大きな粒子)の系
- GUIで、「温度」と「重力」を、interactiveに設定。

タイルディスプレイ表示&3D立体視



3D立体視@東北大学サイバーサイエンスセンター

