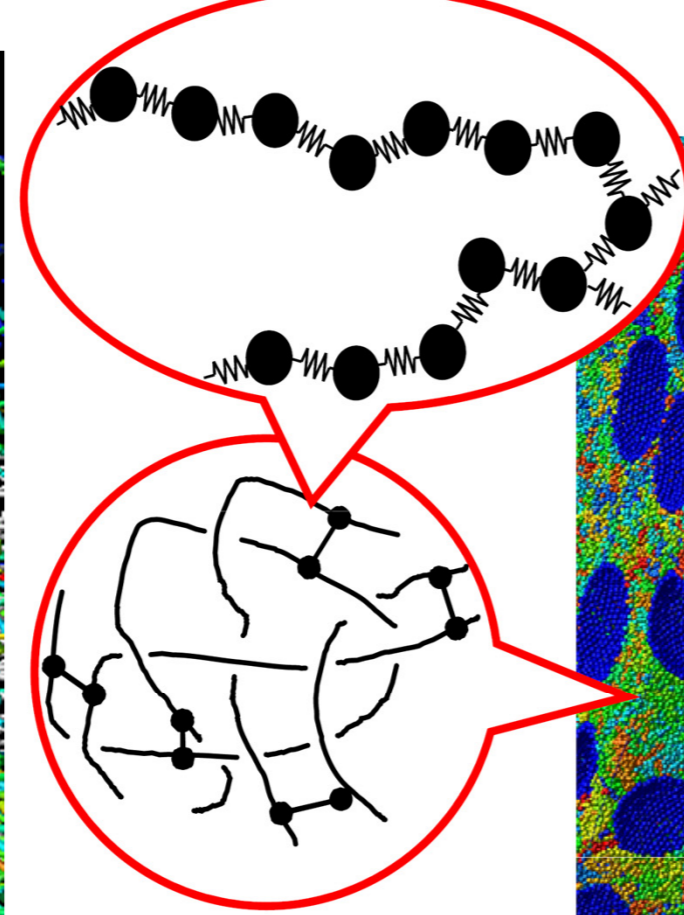
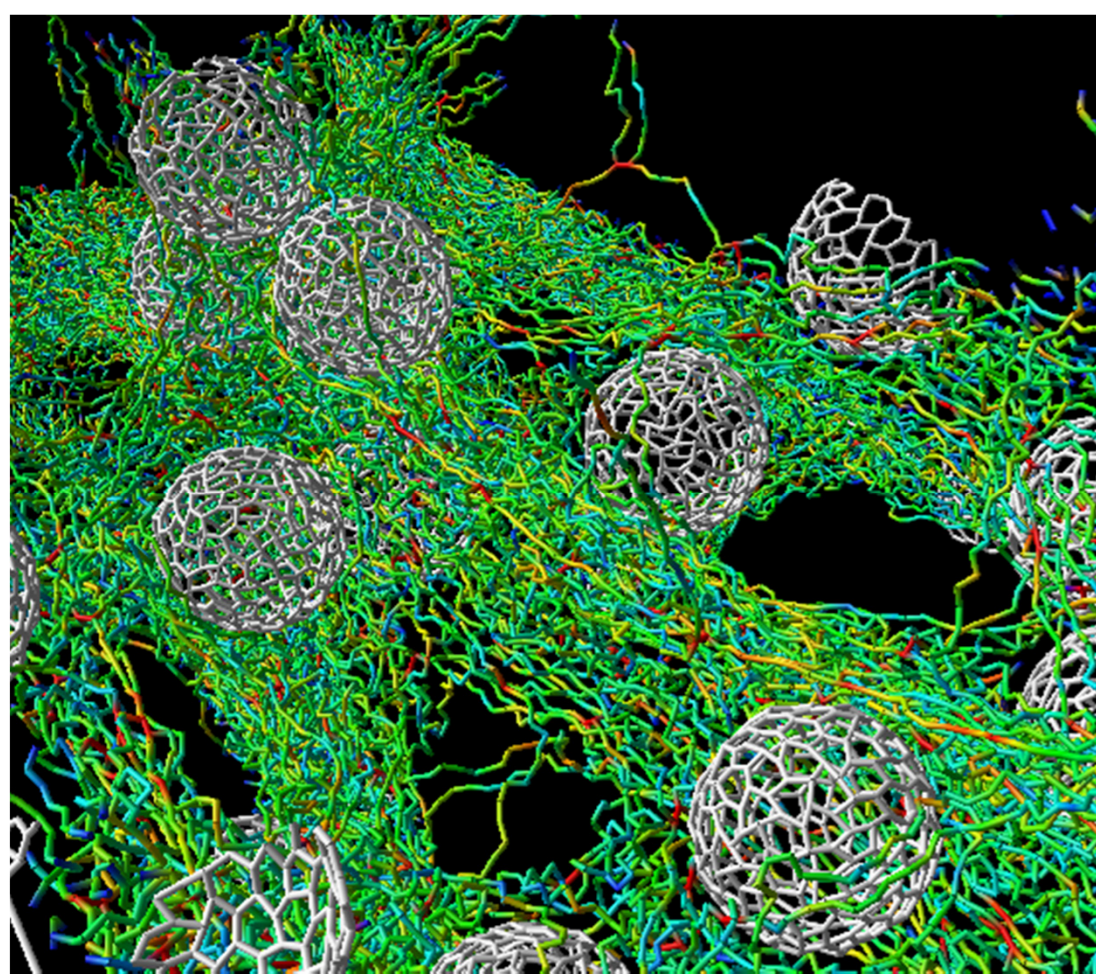


森田 裕史((独)産業技術総合研究所)

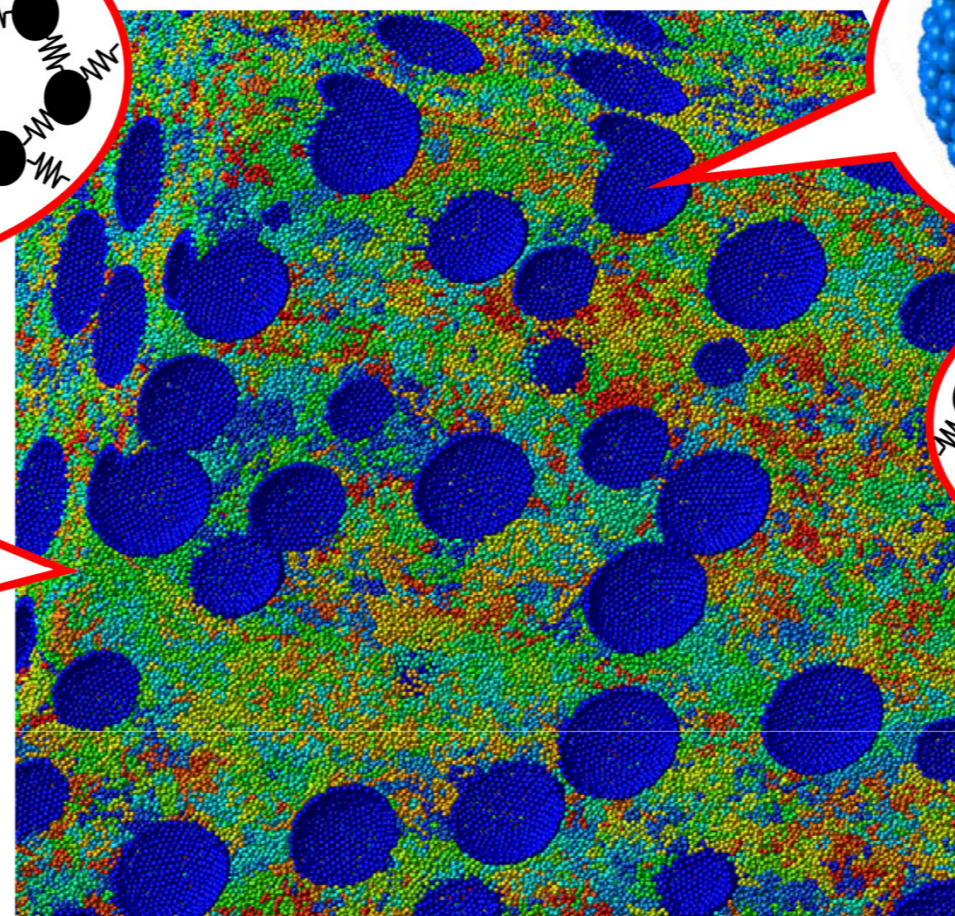
フィラー充填系高分子材料の粗視化分子動力学解析のHPC活用研究



フィラー充填高分子材料

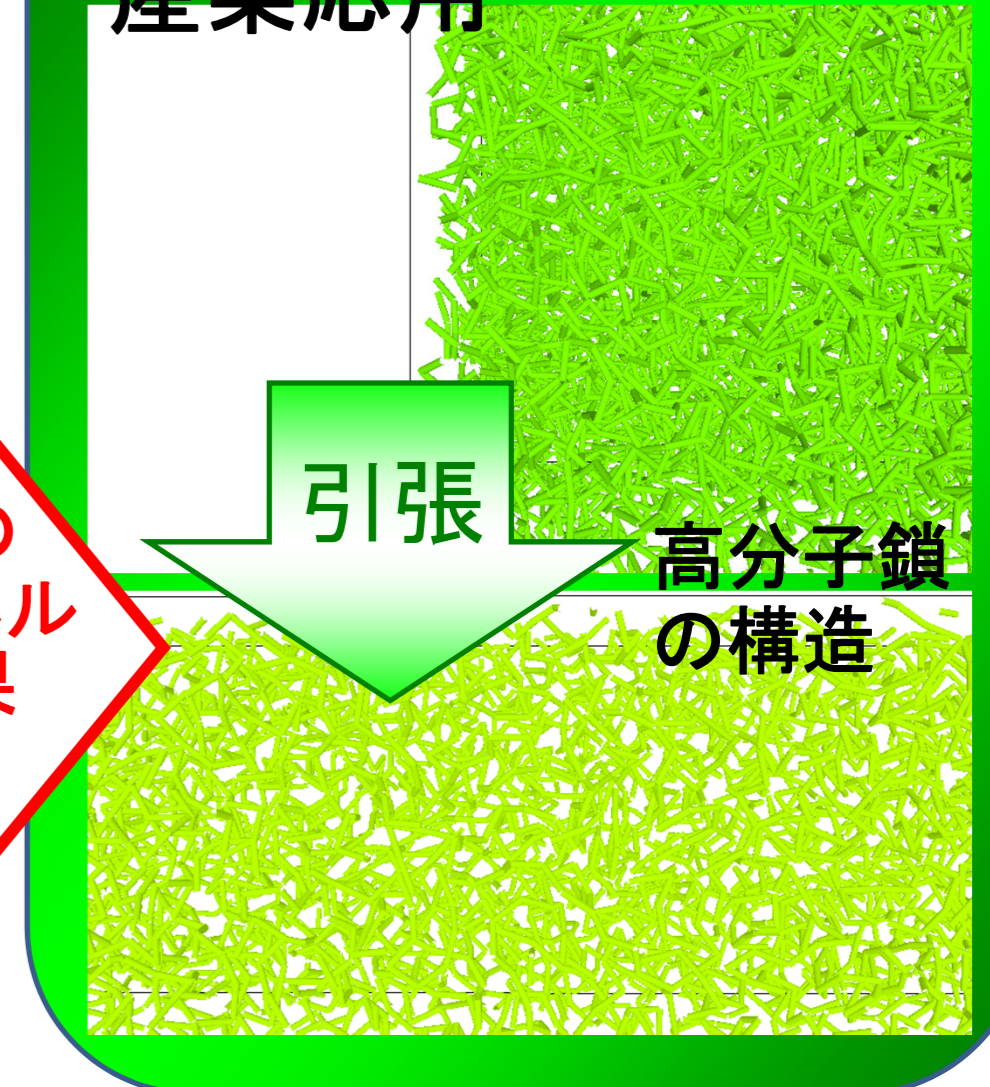


もっとも単純な
バネ・ビーズ模型



高分子の
分子レベル
形状効果
の応用

高機能化／高性能
産業応用



引張

高分子鎖
の構造

これまでの関連研究



代表者： 土井正男先生

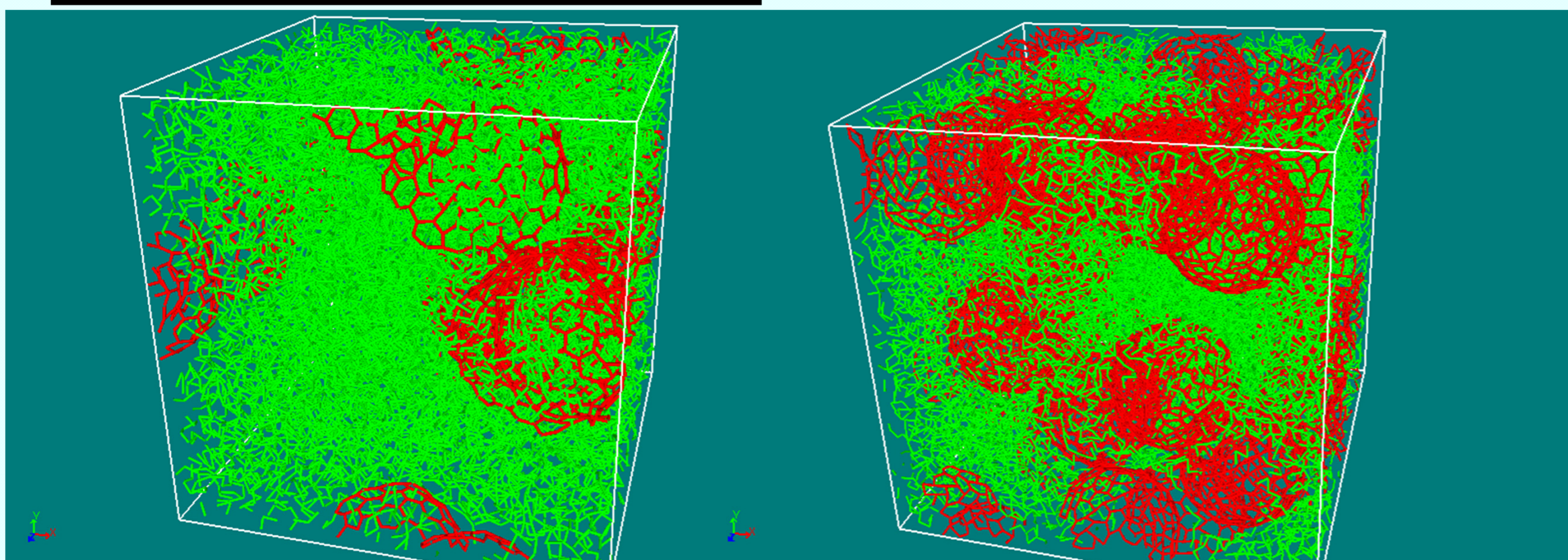
- ・NEDOによる産学連携プロジェクト
- ・ソフトマテリアルに対する統合的なシミュレーター
- ・汎用かつ多階層のスケールにおけるシミュレーター群
- ・UDFファイルを介したシームレスなシミュレーター間連携
- ・OCTA2013でシミュレーターが並列化対応

H22-24学際拠点

- ・防衛大 萩田代表課題。
- ・粗視化分子動力学法を中心とした高分子系粗視化シミュレーション基盤に関する計算機科学的な高度化を検討。
- ・OCTA/conagcのSMP並列化検討。
- ・LAMMPS大規模利用に関する検討。
- ・独自の分散IO／超並列コードに関する検討。
- ・バネビーズ模型系のAVS/Expressでの可視化技法検討。
- ・逆問題解法による実験データからの構造推定。数学的分類。

➡ H25は、「フィラー充填高分子材料研究」に集中

高分子材料研究



少数フィラー系のスナップショット

多数フィラー系のスナップショット

- ・粗視化MDによるナコンポジットの力学的解析における仮想実験技術の確立を目指す。
- ・各大学のスパコンを用いて、OCTA, LAMMPS 等の共労によるナコンポジット系の大規模シミュレーションを実施する。
- ・ナコンポジット関連技術の展開により、産学官連携によるオープンイノベーション基盤技術の確立を目指す。

システム化研究

- ・スパコンを、「手軽に」「便利に」利用したい。
- ・WEBやスマホでの利用(ジョブ監視、ジョブ投入)
- ・ブログ的インターフェースの活用。
- ・定型作業のロボット化
- ・1~3日間の断続的キュー構成での自動継続対応
- ・クラウド計算機の効率的活用
- ・WEBやスマホでの可視化観察。

