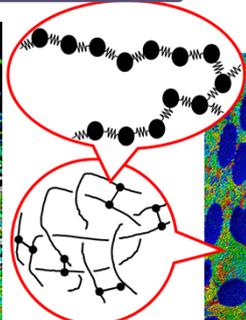
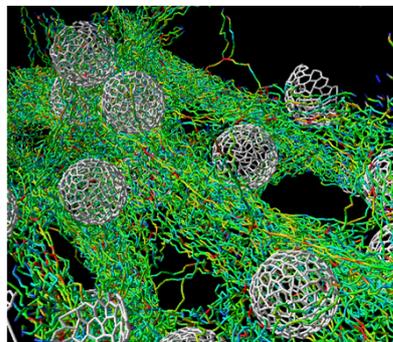
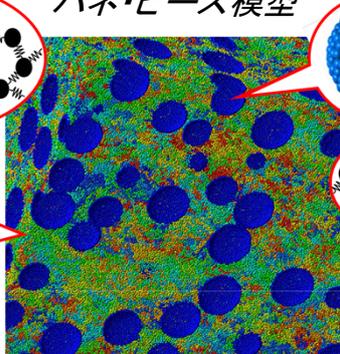




### フィラー充填高分子材料



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
- ・最新版OCTA2013SE

2014年出版

### H22-25学際拠点

H22-H24 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。

H25 産総研 森田代表課題

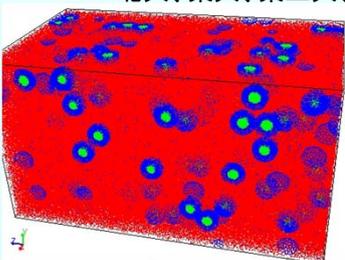
- ・フィラー充填系計算用の基盤プラットフォームの検討。

H26は、「高分子材料研究」の連携にフォーカスする

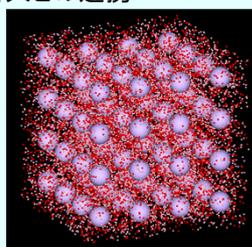
### 高分子材料研究の3つの連携研究

#### フィラー充填材料計算の連携

北大、東大、東工大、名大との連携



フィラー充填系CGMD  
のスナップショット

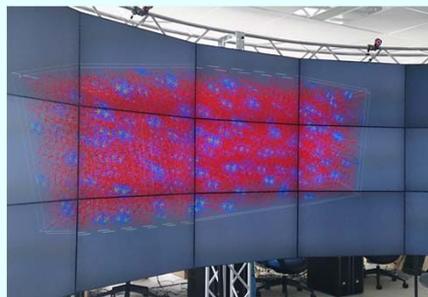


SUSHI-COGNAC連携  
のスナップショット

- ・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。
- ・SUSHI-COGNACによる連携シミュレーション法を用いたナコンポジット材料の仮想実験技術の確立を目指す。
- ・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。

#### 可視化における連携

阪大、名大との連携

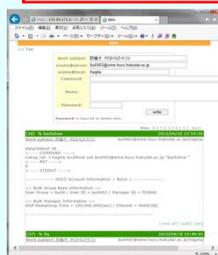


OCTAの結果の3次元描画@阪大うめきた拠点

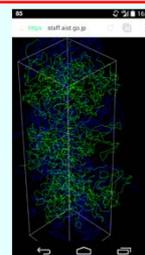
- ・各大学の可視化装置の利用検討
- ・EasyVRを用いたOCTAの描画システムによる3次元立体VR可視化

#### システム化における連携

北大との連携



ブログ的インター  
フェース



スマホ上での  
結果表示

- ・スパコンを、「手軽に」「便利に」利用するための、WEBやスマホ経由によるクラウド対応の利用法。(ジョブ監視、ジョブ投入、可視化)