

## プロフィール

## 土井正男(どい まさお)



### 【現職】

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授

### 【略歴】

1970/4 東京大学工学部物理工学科卒

1974/4 同博士課程中退 東京都立大学理学部物理学教室助手

1976-78 ケンブリッジ大学にてS.F.Edwards教授の下で研究

1978/10 東京都立大学理学部物理学科助教授

1989/8 名古屋大学工学部応用物理学科教授

2004/4- 現職

専門:ソフトマター物理、レオロジー

1998-2002の”高機能材料設計プラットフォームの開発”プロジェクトにて、ソフトマターの統合シミュレータOctaを開発

# 高分子材料シミュレーション 現状と次世代スパコンへの期待

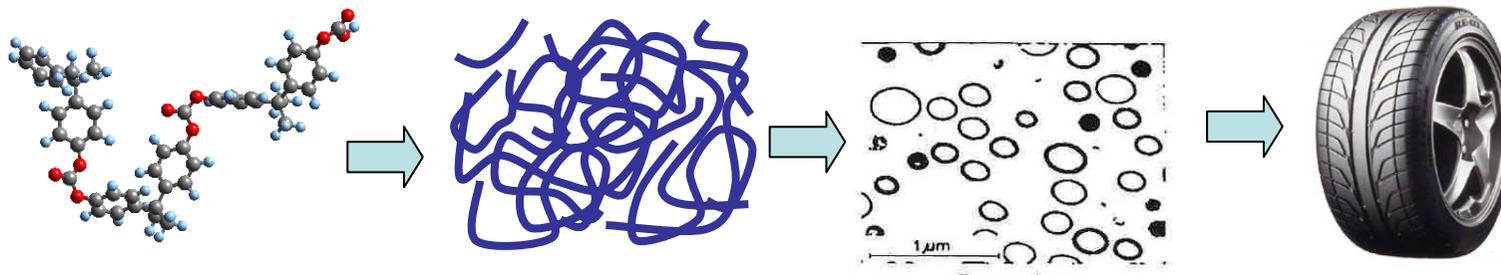
## アウトライン

- 高分子材料シミュレーションの難しさ
- 自律・分散・協調システムの必要性
- Octaシステム
- 次世代スパコンへの期待

# 高分子材料シミュレーションの難しさ

---

- 材料シミュレーションでは、分子スケールの構造と材料特性を結びつけることが期待されている。
- しかし、材料特性は分子構造だけで決まっているわけではない。分子構造が同じでも、集合状態が違えば、特性は全く異なる。
- 材料開発の現場では、界面の制御、分散構造の制御など多くの問題が重要
- これらの問題は大規模計算だけでは解決できない

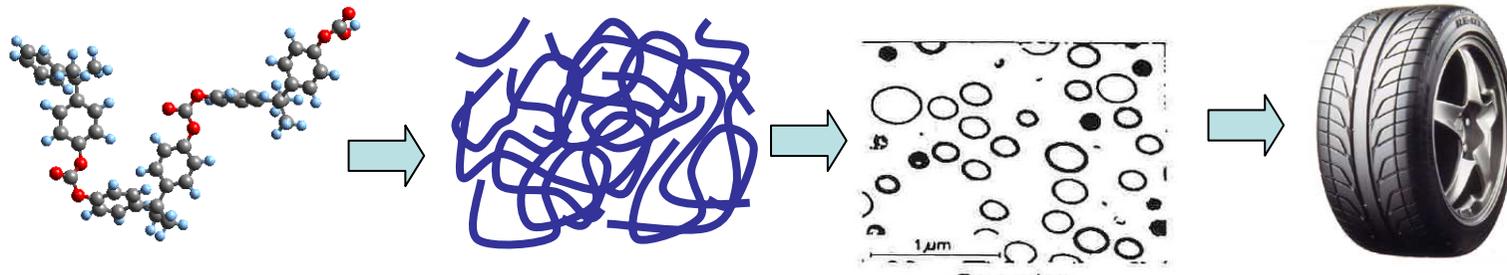


シミュレータの連携が必要

# シミュレータ連携におけるHard Nut インタフェース問題

---

連携に必要なシミュレータ間の情報のやり取りは、物理情報の縮約・拡大の操作を含む高度に複雑な問題である。



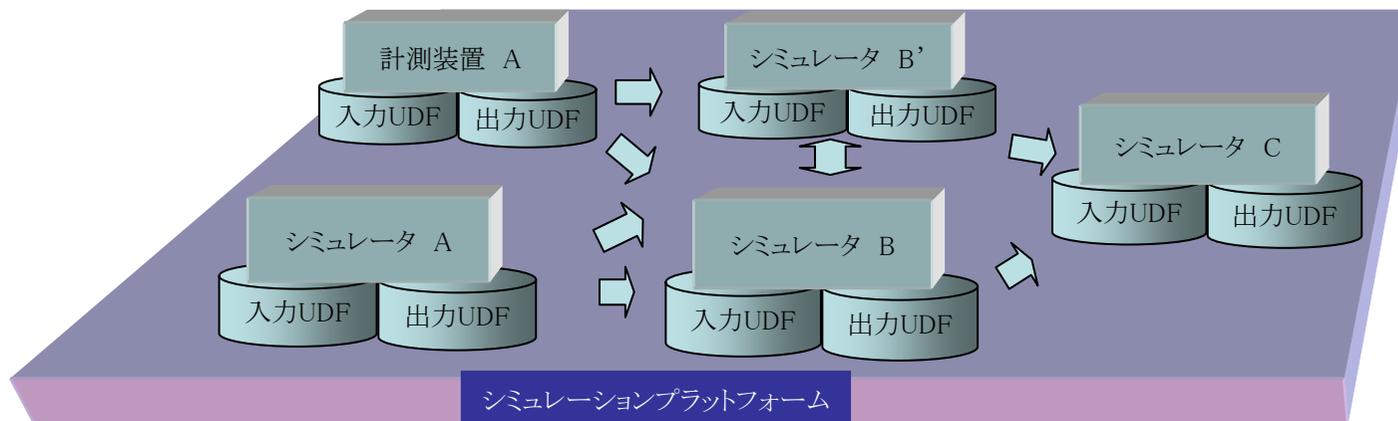
- シミュレータ間のインタフェースを誰が設計するか？
  - プログラムの進化にどう対応させるか？
  - 物理情報の変換の正しさをどうチェックするか？

# 自立・分散・協調方式の連携

## 固定方式のシミュレータ連携



## 自立・分散・協調方式のシミュレータ連携

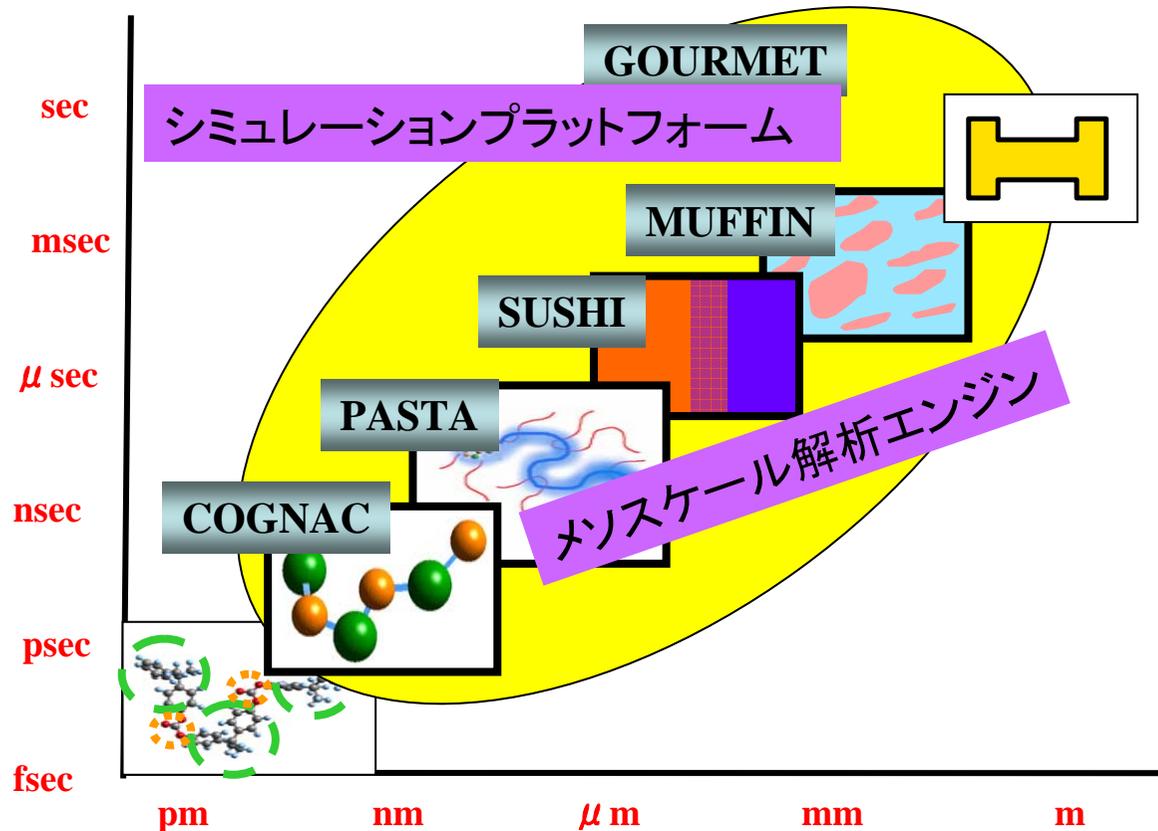


# OCTA システム

- **O**pen
- **C**omputational **T**ool for
- **A**dvanced materials

1998-2002年、名古屋大学における  
産学連携プロジェクトにより開発され  
たシステム

フリー <http://octa.jp>

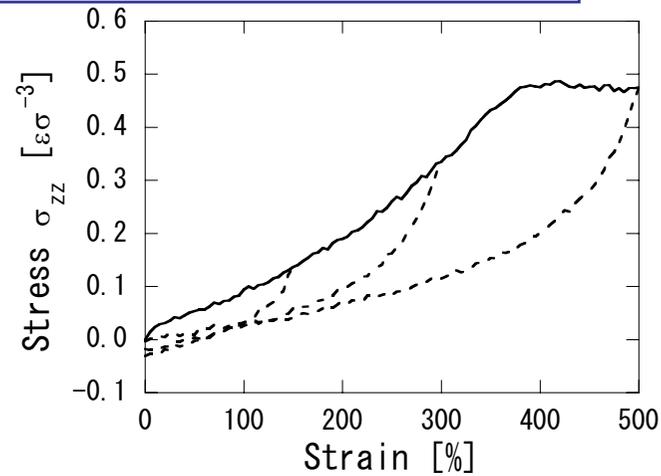
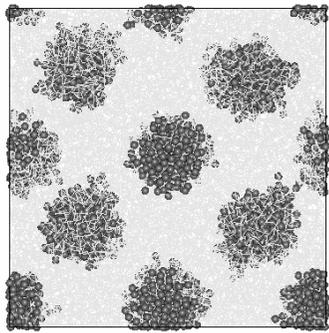


自立・分散・協調方式を  
採用したため

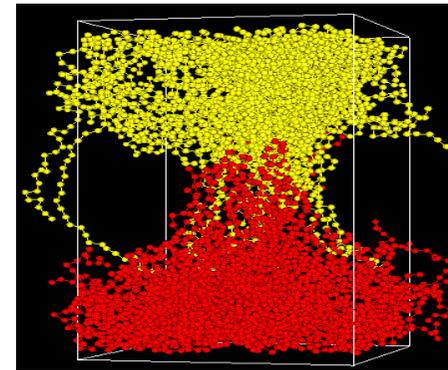
- シミュレータのバージョンアップ
- 新規シミュレータの追加
- 計測システムとの連携が可能であった

# 応用例

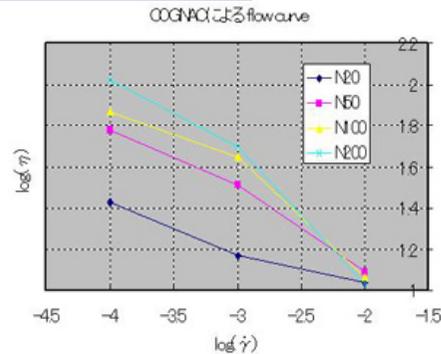
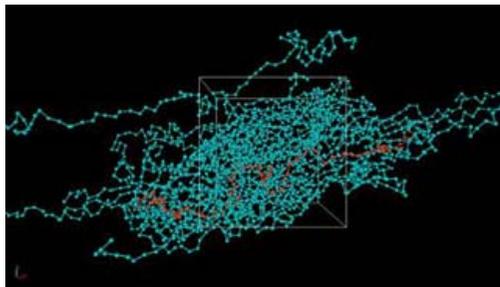
## 熱可塑性エラストマーの力学物性



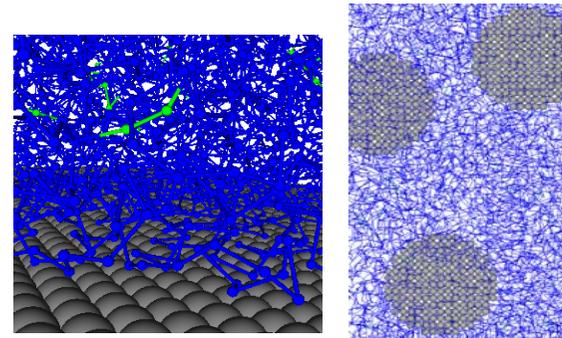
## 高分子グラフト膜の剥離挙動



## 絡み合い高分子の粘度



## ゴム/カーボンの界面



# 次世代スパコンへの要望と期待

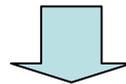
---

## 材料研究者はいろいろな要望を持っている

- 材料開発におけるCAEの技術をつくりたい。
- パソコン、スパコンとスムーズにつながって欲しい。
- ユーザサポートを充実して欲しい。(パワーユーザに対しても、そうでない人に対しても)

## 材料研究者は強い期待も持っている

- ゴム/カーボン系の現実的なシミュレーション
  - ・ 計算機内の、破壊、磨耗、疲労試験
- マルチスケール解析モデルの開発と検証
  - ・ 薄膜の乾燥、構造形成、摩擦、粘着、剥離現象などにおけるモデルの提案と検証



底辺ユーザを視野に入れた次世代スパコンの開発と運用