

複雑流体に対するマルチスケールシミュレーションの開発

情報科学研究科 安田 修悟



キーワード マルチスケール、ソフトマター、生物流体

研究概要

高分子、コロイド、液晶などのソフトマターや細胞、微生物集団などのアクティブマターの複雑な流動に対して、ミクロな分子運動とマクロな流動とを同時に解析することのできる新しいマルチスケールシミュレーション法を開発しています。右図は、マイクロ流路における高分子液体の熱潤滑をマルチスケール法によって解析したものです。ここでは、多数の分子動力学計算セルをマクロな物理法則(保存則)が満たされるように連結することで、マイクロ流路内での高分子液体の熱流動を分子動力学レベルの解析精度でシミュレーションすることを可能にしています。

アピールポイント

ソフトマターやアクティブマターは機能性材料の宝庫と言われています。マルチスケール法は、ミクロな構成要素レベルでの運動とマクロなレベルで起こる機能発現との関係性のメカニズムを明らかにすることを通して、新しい機能性材料の開発に資することができると考えています。

応用分野

ソフトマター、流体工学など

Synchronized Molecular Dynamics

