

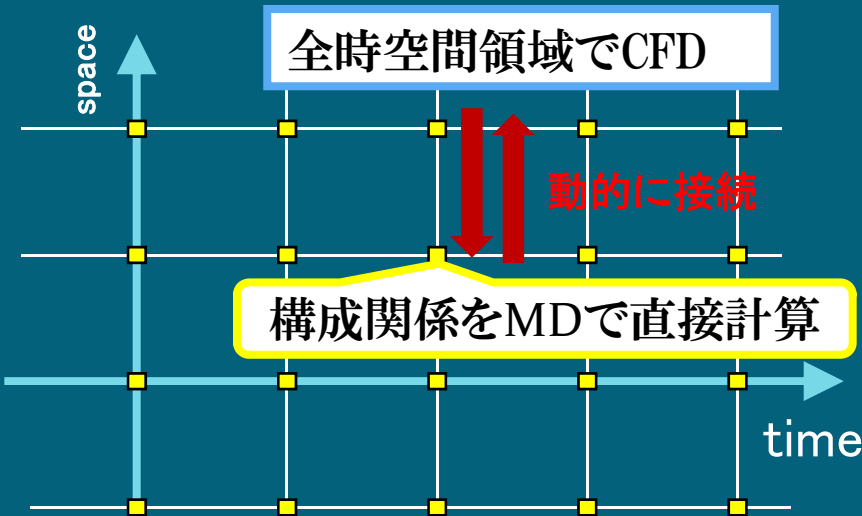
(ソフトマターとは、高分子・コロイド・液晶・ガラスなど柔らかくて変形しやすい物質を総称)

ソフトマターシミュレーションの課題

- 複雑なレオロジー 構成方程式の構築が難しい。CFDが困難
- 長時間の緩和現象&大規模な協調運動 MDで実行可能なスケールをはるかに超える

そこで、MD/CFDのハイブリット計算

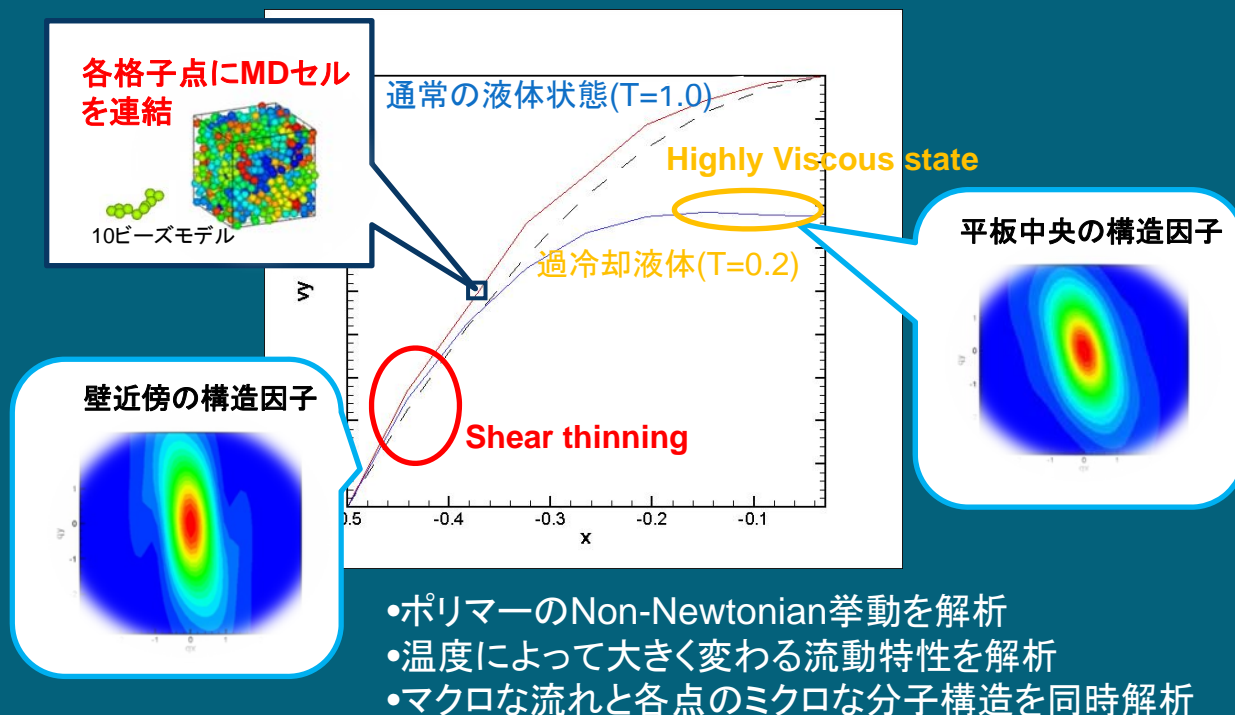
局所サンプリング (Local Sampling, LS) 法



- 材料特性を分子レベルでモデル化
- 長距離&長時間現象を計算可能

LS法によるハイブリット計算の例

高分子液体のチャネル流れ



次世代スパコンへの展開

LS法では多数のMDを同時に計算

→ ほぼ理想的な超並列度を達成することが期待できる