

分子動力学と流体力学の連成シミュレーションの構築

兵庫県立大学 情報科学研究科 氏名 小田浩太郎

目的 分子の構造や特徴が流動に及ぼす影響を予測する汎用的なシミュレーションを構築する

内容 平面に挟まれた流動解析において、各計算格子を連続体でなく、分子計算セルに置き換えることで、現象論による応力の構成則を用いず流動場を解析する。

結果 ニュートン流体で速度場と圧力場の数値解が理論解とよく一致した。非ニュートン流体ではシェアシンニングによりニュートン流体と異なる速度場と圧力場の数値解が得られた。

利用した計算機 OCTOPUS汎用CPUノード群
ノード時間 1200 時間
使用メモリ 10 GB
並列化 16ノード 並列

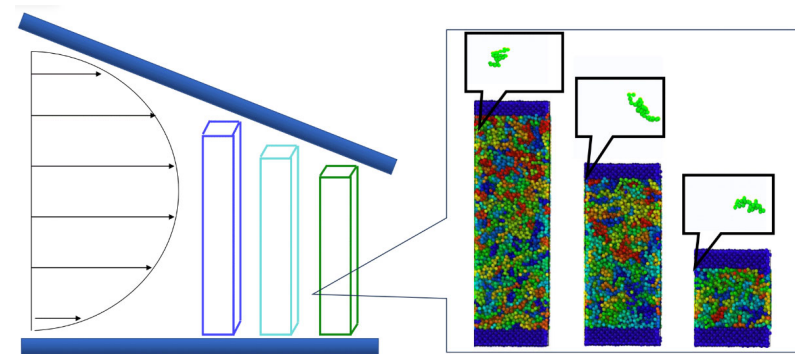


図 (シミュレーション結果)