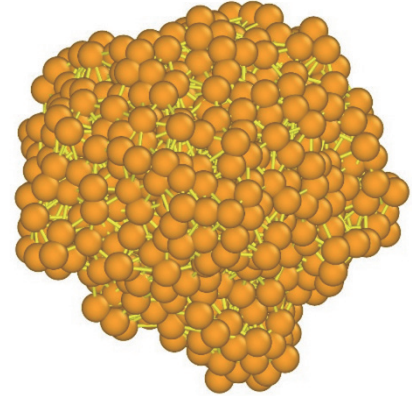


ブラウン動力学シミュレーションとその応用

研究の概要

液体中の微小な粒子は、溶媒分子との衝突によって絶えず不規則に運動しています。ブラウン動力学法は、この熱ゆらぎと粒子間相互作用を取り入れ、分子や粒子の動きを計算機上で再現する手法です。

本研究室では、高分子、タンパク質、DNA、コロイド分散系などを、目的に応じて粗視化した粒子モデルで表し、拡散、緩和、凝集、粘弾性などを解析しています。また、通常の拡散から外れる異常拡散や非ガウス揺らぎを統計的に捉え、その背後にある不均一性や記憶効果を明らかにする理論やシミュレーション手法も開発しています。こうした物理系の研究において提案した数理モデルを、生成 AI で用いられる拡散モデルに応用する取り組みも進めています。



ブラウン動力学シミュレーション
により得られた凝縮高分子の構造
スナップショット

研究の特徴

本研究室の特徴は、原子一つ一つを追う分子動力学よりも大きな時間・空間スケールを扱える粗視化ブラウン動力学と、統計物理学に基づく解析理論を一体的に用いる点です。粒子間力だけでなく、流体を介した相互作用、時間とともに生成・消滅する架橋、摩擦や拡散性ゆらぎなどの影響を調べています。特に、非ガウス性などの統計量の緩和特性から、観測された複雑な運動を生む要因を明らかにすることを目指します。高分子の凝縮・ガラス化、交換可能な架橋をもつ材料、タンパク質の構造揺らぎ、DNA のループ形成、拡散モデルなど、一見異なる対象を共通の数理的枠組みで扱います。

実用化が想定される分野

ソフトマター、レオロジー、時系列データ解析

研究者からのメッセージ

「観測された複雑な揺らぎの原因」を計算機と理論で解き明かします。材料のメソスケール動態に関する課題があればご相談ください。

研究分野 : 統計物理学、数理物理、応用数学

研究者の所属部局・職位・氏名 : 和歌山大学システム工学部 応用理工学領域・教授・宮口智成

本件に関するお問い合わせ : liaison@ml.wakayama-u.ac.jp