

コロイドガラス平均場理論の数値解析

大阪大学 サイバーメディアセンター 吉野 元

目的 最近我々が開発した並進・回転自由度を併せ持つ粒子系のガラス転移に関する平均場理論を用い、パッチコロイドおよび楕円体コロイドにおける並進・回転自由度のガラス転移を明らかにする。

内容 上記平均場理論によって与えられる状態方程式を数値的に解き、並進・回転自由度のガラス秩序パラメータなどの振る舞いを解析した。

結果 SX-ACEでのベクトル化・並列化(openmp)を用いることにより、上記状態方程式の解析に必要な多重積分を高速に実行することができた。その結果、広いパラメータ領域での解析を行い、相図を明らかにすることができた。

利用した計算機

SX-ACE

ノード時間 120時間

使用メモリ 1GB

ベクトル化率 99.5%

並列化 4並列

