

環状混合系の高分子物性のシミュレーション

防衛大学校 応用物理学科 氏名 萩田 克美

目的 環状鎖と線状鎖が混合した系の高分子物性を効率よく計算するために、分子動力学(MD)シミュレーションで多数のGPUを活用する技術確立するとともに、物性を調べる具体的なプロダクトランを行う。

内容 阪大のGPU環境で、LAMMPS、HooMD-blue、Gromacsを利用し、多数のパラメータ条件の環状混合系のMD計算を効率よく実行するフレームワークを開発した。それを利用し、プロダクトランを実施した。

結果 環状鎖と線状鎖が多数混合された系について、平衡状態において、環状鎖を貫通する線状鎖の数(n_p)分布の、環状鎖の大きさ(N_{ring})に対する依存性を明らかにした。(Polymer 2021, 218, 123493)

さらに、研究を発展させるために、種々の予備計算を実施した。

利用した計算機

ノード時間
並列化

OCTOPUS(GPU)

50000時間
4並列

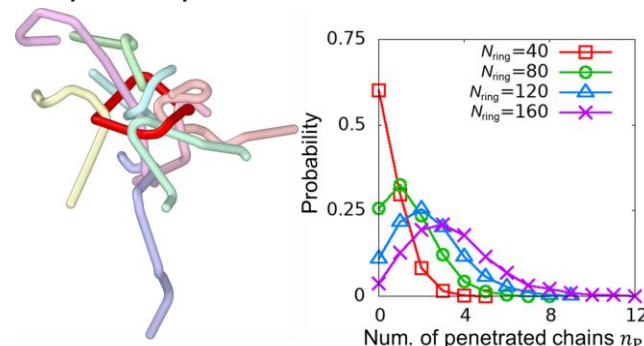


図 (左)環状鎖を貫通する鎖のイメージ
(右)環状鎖を貫通する鎖数(n_p)分布