

高分子物性の大規模分子シミュレーション

防衛大学校 応用物理学科 氏名 萩田 克美

目的 高分子系の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を活用する技術を確立するとともに、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を相互利用し、全原子模型、ユナイテッドアトム模型、Kremer-Grest模型、散逸粒子動力学模型などの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 環状鎖を含む高分子系の挙動を詳しく調べた論文を出版した。

(Comput. Mat. Sci. 2022, 203, 111104. Polymer 2022, 243, 124637. Polymer 245, 2022, 124683.) 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

ノード時間

SQUID(GPU/CPU)

約5700時間(GPU)

約4600時間(CPU)

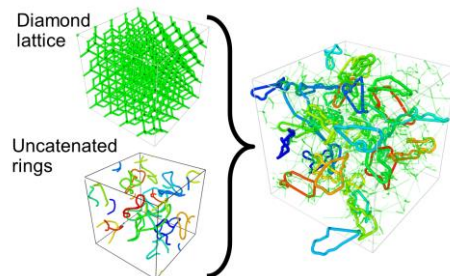


図 架橋ネットワークに重ね合わせた環状高分子のイメージ