

計算科学による複合材料設計

大阪大学 工学研究科住友電工共同研究講座

山崎隆浩、荻原寛之、赤田巧

目的 界面特性を制御した複合材料を計算科学を利用して設計する

内容 第一原理計算プログラムなどを用い大規模系を精度よく扱う手順を確立し、材料設計ツールとして利用する

結果 500原子規模の系の構造のエネルギー計算を第一原理計算プログラムPHASE/0を用いて行った。また、これらの結果を教師データとして作成したNNPを使ったより大規模な古典分子動力学計算はGPUノードを用いることで計算時間が短縮できることを確認した。

利用した計算機 SQUID汎用CPU
およびGPUノード

利用資源 11,000 SQUIDポイント
使用ソフトウェア PHASE/0-2021.01、
LAMMPS (+DeePMD)

並列化 汎用CPUノード：最大76x8 MPI 並列
GPUノード：最大8GPU並列

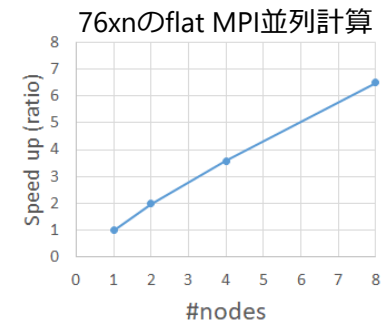
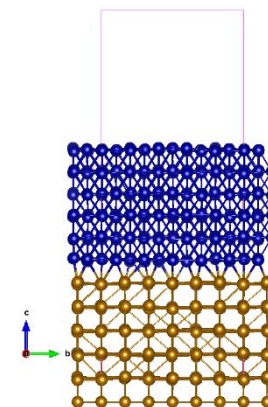


図 PHASE/0で計算したFe/Co界面構造
(左)、および並列化効率 (右)