

分子動力学計算によるポリマーDB構築

旭化成(株) デジタル共創本部 インフォマティクス推進センター R&DDX部 一岡優里

目的 MIによる高機能ポリマー探索を行うため、分子動力学計算データベース（DB）を構築すること。

内容 大量のポリマー種に対し、分子動力学計算ソルバーのLAMMPSを用いて複数の物性値を計算、その結果を蓄積することでDB構築を行う。

結果 約3000種のポリマーに対し密度や比熱等の物性計算を実行、MIに用いるためのDB構築が完了した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 80000 時間
使用メモリ 5TB
使用ソフト LAMMPS