

高分子物理モデルによるシミュレーション研究

防衛大学校 応用物理学科 萩田 克美

目的 高分子物理モデルによって、環状鎖を添加した架橋ネットワークの物性を評価することを目指し、分子動力学(MD)シミュレーションの手法、特に、GPUとCPUのHPC環境の活用を検討する。

内容 阪大のCPUとGPUの環境で、LAMMPS、HooMD-blueを相互利用し、Kremer-Grest模型の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、物性評価の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。

(Macromolecules 2022, 55, 6547. Macromolecules 2022, 55, 8021. Macromolecules 2023, 56, 15. Polymer 2023, 269, 125733) 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(CPU/GPU)

(調査中) 時間(CPU)

(調査中) 時間(GPU)



図 架橋ネットワークに添加した環状高分子のイメージ