

MDシミュレーションによる高分子材料の誘電率評価

東京大学工学系研究科 北井 孝紀

目的 MDによる高分子材料の誘電特性を含む物性評価

内容 平衡MD計算によって高分子材料の複素誘電率および線膨張係数等の物性を評価する手順に従い、多数の分子に対して計算を実施し、まとまったデータを取得した。

結果 並列化効率の高いノード内MPI並列で、500種を超えるポリマー材料の計算を完了した。得られたデータに特徴量選択手法を適用することで、スクリーニングに有用と考えられる分子構造に関する特徴量を抽出した。

利用した計算機
ソフトウェア
ノード時間
使用メモリ
並列化

SQUID汎用CPUノード群
LAMMPS
39000時間
~3GB
1ノード 76 MPI並列

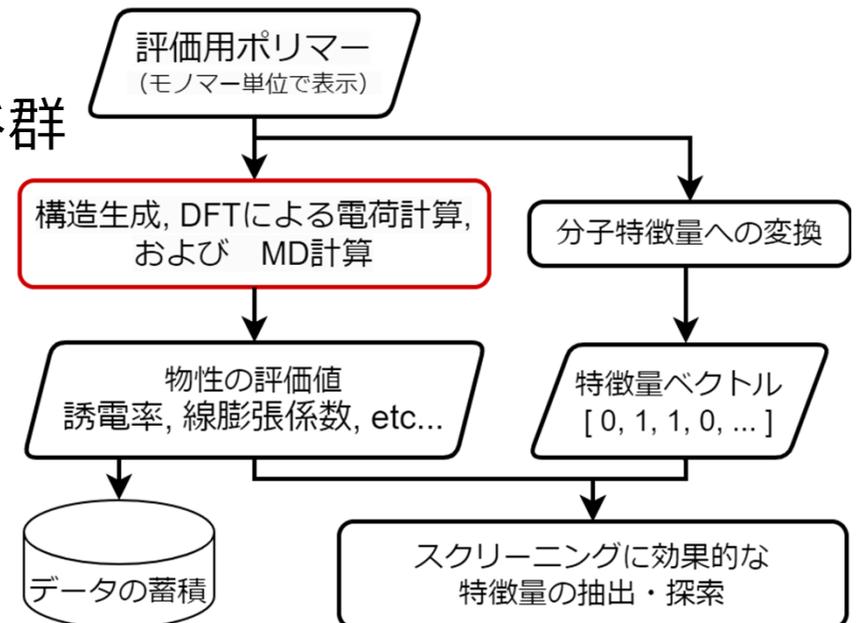


図. 計算のフロー