

RadonPyを用いた分子動力学計算

大阪大学大学院工学研究科日本触媒協働研究所

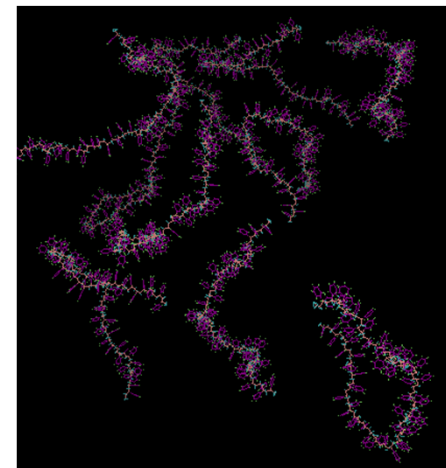
山本 啓太

目的 機械学習を用いて材料開発を行うマテリアルズ・
インフォマティクス(MI)においてデータの質と量が重要となる。
ポリマーを対象とした分子動力学について検討を行った。

内容 高分子物性自動計算システムRadonPyと分子動力学計算ソフトウェア
LAMMPSを用いて分子動力学計算を行った。

結果 400種のポリマーに対して分子動力学計算を実行し、
緩和構造を得た。

利用した計算機	SQUID CPU
ノード時間	47000時間
使用メモリ	250GB
ソフトウェア	Radonpy, LAMMPS
並列化	76並列



図：計算の様子