

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 データインテリジェンスセンター 先端技術戦略部 石山裕輝

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。

内容 大量のポリマーに対し、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DBに蓄積する。

結果 これまで構築したポリマーDBに対し、今年度は新規構造や計算物性の追加を行い、MIに用いるためのポリマーDBの拡充を進めた(数千構造)。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 35000 時間
使用ソフト LAMMPS