

有機無機ハイブリッド材料による 分離膜向けMD技術

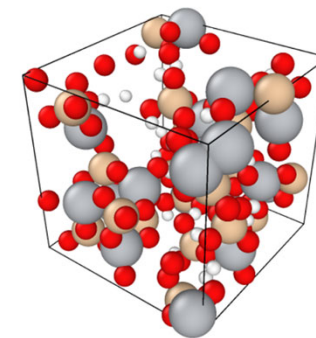
神戸大学大学院 科学技術イノベーション研究科 川口 博

目的 有機無機ハイブリッド材料による分離膜を題材とし、AIを活用することで従来の分子動力学（MD）より高速かつ高精度なMDシミュレーションを可能とする技術を開発する

内容 始点として、無機膜材料に対する第一原理分子動力学シミュレーションによって、データセットの作成を行った。

結果 無機膜材料に対する第一原理分子動力学シミュレーションによって、データセットの作成が完了した

利用した計算機	SQUID 汎用GPUノード群
ノード時間	1,778.56 時間
使用メモリ	52.1 GB
並列化	8ノード 並列



作成した構造データの例