

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

粗視化分子動力学法を用いたフィラー充てんゴムの解析

2) 利用意義（産業利用の観点から）

タイヤ産業においては循環型社会および低炭素化社会の実現のため再生可能資源の拡充と、製品ライフサイクルを通じたCO₂排出量削減への努力が続けられている。CO₂排出量削減のためには、タイヤのライフサイクルの中で、使用中における自動車の燃費としてのCO₂排出への寄与が大半を占めることから、転がり抵抗を低減した低燃費タイヤの更なる進化が求められている。

本研究において粗視化分子動力学法によるフィラー充填系の大規模解析を行うことで、転がり抵抗低減ゴムの設計指針が得られると期待される。

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

社内での解析においては対象空間が数十 nm 程度と小さく、取り扱えるフィラーの数も少ない。このため、大変形下ではフィラーの変位が十分に表現できなかつた。これを数百 nm 程度まで拡大することにより、十分な変位が表現可能となる。本研究で必要とされる計算を社内で実施することは、必要なメモリ量と計算時間とから不可能であり、大規模計算が可能なFX10スーパーコンピューターシステムの利用が必要である。

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果（成果が得られなかった場合はその理由）

※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

（①. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他）

今回の利用に関しては分子動力学シミュレータのLAMMPS[1]のコンパイルと並列化効率の測定を実施した。オプションの最適化後、250万粒子系を10万Step平衡計算した場合の計算時間をプロットしたものが図1である。

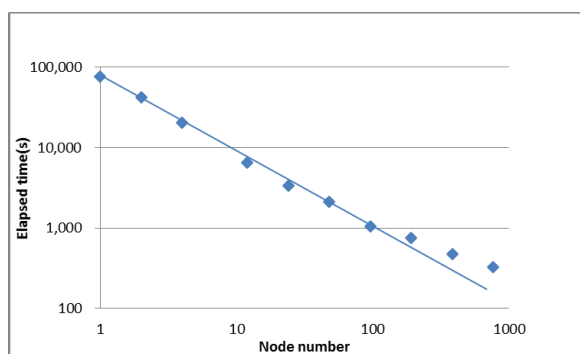


図 1

100 ノード程度まで線形性が保たれることから1コアあたり約1500粒子以上であれば計算効率の低下が少ないことが判った。

今後は上記検討に必要なモデルサイズの検討を実施する予定である。

[1] <http://lammps.sandia.gov/>

2) 社会・経済への波及効果の見通し

本研究を継続することでエネルギーロスが優れたゴム材料の開発が可能になり、転がり抵抗が少ない優れたタイヤを供給することが可能になると考えている。

3) その他の成果