

| |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>1. 利用の概略</p> |
| <p>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</p> |
| <p>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。</p> |
| <p>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った。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も実施することは、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。</p> |
| <p>2. 成果の概要</p> |
| <p>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フィラーが周期境界条件による影響を受けないモデルの大きさについて検討した。図 1 に基本モデルを示す。基本モデルは長さ 1000 粒子の直鎖形状のポリマー80 本、架橋剤 800 個およびフィラー2 個（フィラー径：30σ）からなり、フィラーは体心立方になるように配置されている。このモデルを縦横高さ方向にそれぞれ N 倍積み重ねたモデルを×N3 モデルとする。</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div data-bbox="285 871 550 1147"> </div> <div data-bbox="664 871 1098 1136"> </div> </div> <p>図 1</p> <p>図 2</p> <p>ポアソン比 0.5 の条件下、ひずみ速度 $1.0 \times 10^{-5} \text{ } \tau^{-1}$ で伸長比 4 まで一軸伸長し、SS カーブを得た。基本モデル、×8 モデル及び×27 モデルについては境界条件からの影響を受けたことによる空隙の発生に起因する不連続な変形がみられる。（図 2）×64 モデルより大きいモデルに関しては境界条件の影響を受けずに同一の SS カーブが得られることを確認した。</p> |
| <p>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。</p> |
| <p>3) その他の成果</p> |

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。