
1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

タイヤ用ゴム材料などの高分子材料の大規模シミュレーションに関する基礎技術について検討する。本研究ではゴム材料の粗視化分子動力学シミュレーションを行い、ゴム中のフィラー構造が物性発現に果たす役割について検討する。これにより、シミュレーション技術の高度化を図り、ゴム材料の研究開発に役立つ知見を得ることを目的とする。

2) 利用意義(産業利用の観点から)

タイヤ用ゴム材料は架橋高分子中にフィラーと呼ばれるナノ粒子が充填された複雑なコンポジット材料であり、シミュレーションは物性機能発現機構の解明に寄与すると期待されている。本シミュレーション技術は次世代の高機能ゴム材料の設計開発に応用できるため、本研究は産業利用の観点から大きな意義を持つテーマである。

3) スーパーコンピュータを利用する必要

自社のコンピュータシステムで実施可能な粗視化分子動力学シミュレーションの粒子数は数万粒子程度であるが、ゴム材料のモデル系としては小さいためシミュレーションから得られる情報に限界がある。名古屋大学情報基盤センターの大規模計算環境でノード間並列計算を行うことにより数十万から数百万粒子のシミュレーションが可能になることから、ゴム材料のモデルについてこれまでできなかった様々な検討が可能となる。

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)

フィラー充填ゴムの粗視化分子動力学シミュレーションにおいて重要なフィラーのモデル化技術について検討した。ゴム中でフィラーは凝集体を形成しており、凝集体構造の違いがフィラー充填ゴムの力学物性に大きく影響すると考えられている。ゴム中のフィラー構造は超小角 X線散乱 (USAXS) 実験で調べられており、USAXS 実験で得られた散乱曲線から逆モンテカルロ(RMC)法シミュレーションでフィラー構造を構築する技術は、フィラー凝集体のモデル化技術として非常に有効である。本研究でRMC法における計算条件の検討を行い、従来より少ない試行回数で散乱曲線実験データと一致するフィラー配置を得る条件を見出した。またRMC法で得られたフィラー凝集体構造を解析して構造特徴量を得ることにより、ゴム中のフィラー構造に関する知見が深まった。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

本研究により高分子材料のシミュレーション技術の高度化が進んでいる。本技術はまだ発展途上であるが、本年度の研究で得られた知見を高機能ゴム材料の開発に応用することで、より高性能の次世代ゴム材料の開発に結び付くと期待している。

3) その他の成果
