

高分子系の粗視化分子動力学法の 超並列大規模コードの開発

防衛大 萩田 克美

革新的なタイヤ新材料の創出へ《目的》

- ・国内CO2排出量の約3%は、タイヤが起源。
- ・これまで、高分子とナノ粒子などを経験的に改良。
- ・現在のタイヤ材料は、発明後100年立つが、**補強や摩擦のメカニズム**等、よく分かっていないことが多い。
(高分子物理学が、挑戦すべき課題である！)

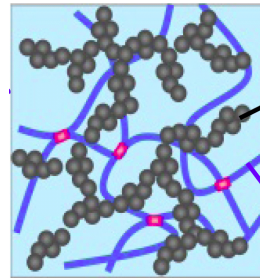
サブマイクロスケールでの材料開発・探索
高分子材料の次世代デジタル・エンジニアリング

超並列大規模計算《手法と予備的結果》

- ・大規模高分子系の**超並列コードを独自に作成**。
→アメリカやヨーロッパとの開発競争で一步先行。
→超並列化により、扱う規模の制約がなくなった！
ナノ～マイクロまでの空間領域の計算が可能
- ・平衡化された高分子配置の高速作成法を考案。
→必要計算時間の劇的削減と計算の良さを向上
- ・今年度、**地球シミュレータでの予備計算**
(32 / 256個のナノ粒子の系: 約100 / 800万粒子)

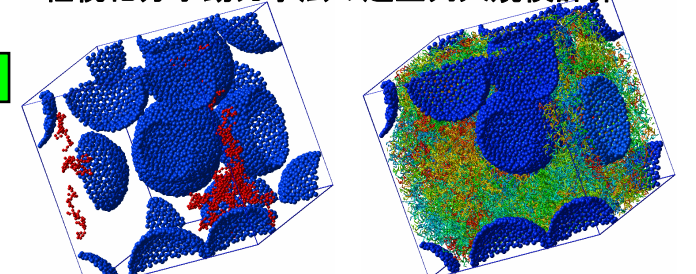
独自の空間分割法
自己組織化ダイナミクス
によるインバランス解消

超並列の特徴を活かした、ずり
変形の“独自”アルゴリズム開発



高分子・ナノ粒子挙動の予測

粗視化分子動力学法の超並列大規模計算



1本のみ表示

全ての鎖を表示 (ナノ粒子6個 [青色] と 1024粒子の鎖70本)

1280粒子で表面を構成するナノ粒子の直径は、約15nm
高分子の粒子間ポンド長は、約0.67nm

ナノ粒子挙動の観測

SPring-8



Direction for Elongation

160m

直径数十～数百nmのナノ粒子がゴム中に分散し、ゴムを補強。
応力に応じて、パターンが変化。

2次元パターン RMC解析

地球シミュレータ

- シミュレーション検証を目的とした**新タイヤ材料生成と評価実験**。
- NLS (ES→次世代スパコン→XXX)**と**NIS (分子研など)**の活用。
- 垂直深耕と水平展開**(手法: 量子化学、対象: 高分子材料全般など)。
- X線 (SPring-8)、中性子 (J-PARCなど) の先端大型実験と連動した計画・体制。 → **すべての研究成果がスパコンで繋がる!**

[共同研究者: 土井正男(東大)、雨宮慶幸(東大)、高野宏(慶應)、森田裕史(産総研)、篠原佑也(東大)、防衛大、住友ゴム工業、他]

計算機資源に対する謝辞: 海洋研究開発機構《戦略活用、先端イノベ》、自然科学研究機構(分子研)、東京大学 物性研究所、北海道大学 情報基盤センター、名古屋大学 情報連携基盤センター《先端イノベ》