

地球シミュレータ産業利用シンポジウム2011

日時:2011年10月19日

場所:学術総合センター

ゴム中のナノ粒子ネットワーク構造の モデル構築による高性能タイヤの開発

住友ゴム工業株式会社

材料開発本部

岸本 浩通

1 背景

走行中の自動車のCO₂排出割合



タイヤの転がり抵抗→車の燃費の約20%に影響
我が国のCO₂排出量(運輸部門)の3%に相当

転がり抵抗を50%低下できれば...

我が国のCO₂排出量(運輸部門)の約1.5%を削減

国際的なタイヤ低燃費化への関心の高まり



『Wetグリップ性能』&『転がり抵抗』の評価システム

H22年1月...ラベリング制度の導入

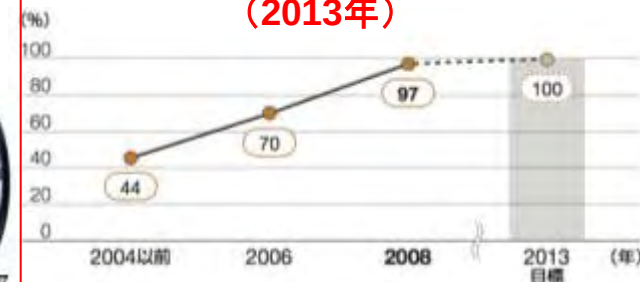
H24年11月...EU新タイヤ表示規制

2 背景 ～当社の2つの環境対応への取り組み～

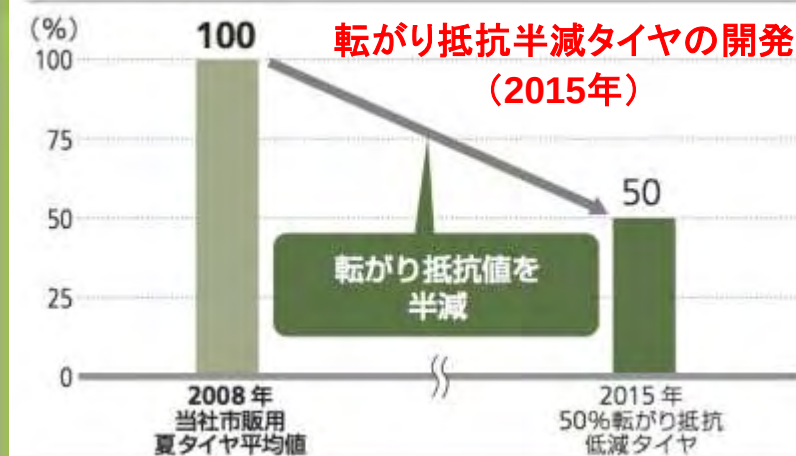
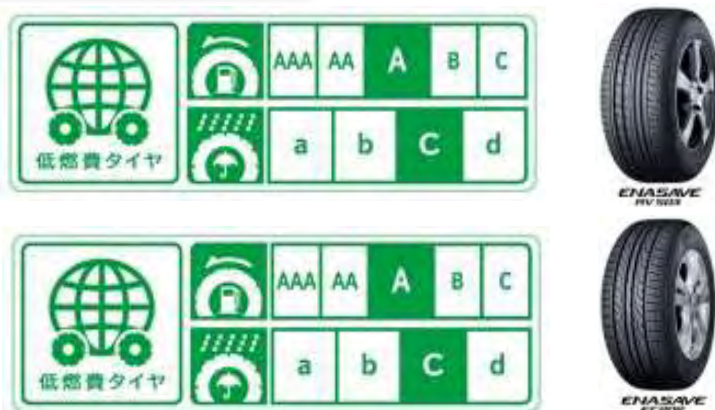
石油外天然資源タイヤ



石油外天然資源100%タイヤの開発 (2013年)



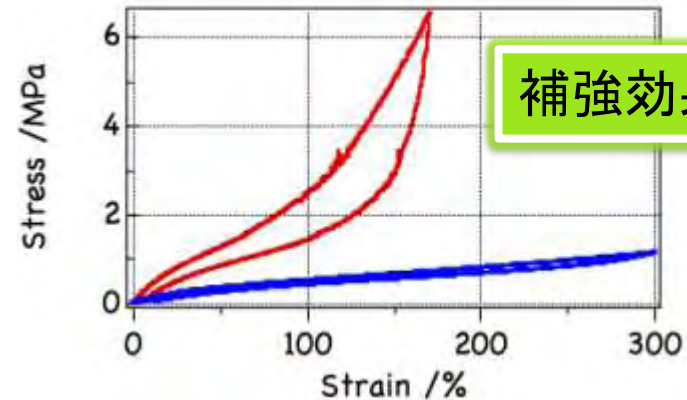
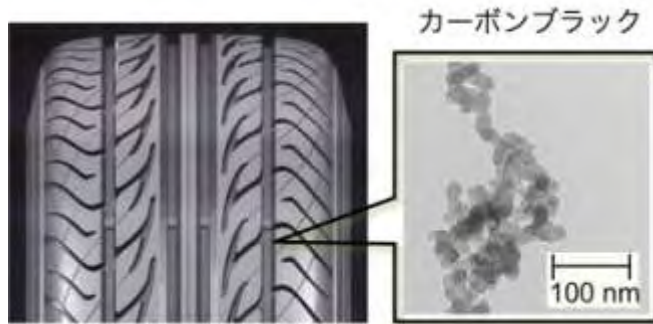
低燃費タイヤ



『環境に優しく・より安全に』 ⇒ 低燃費性能の実現に加えグリップ性能を向上

3 背景 〜タイヤ低燃費性能とグリップ性能の両立〜

ゴム中に分散されたナノ粒子の特異な性質



ナノ粒子の効果(補強効果)

- * 弾性率・応力が増大(耐久性向上)
- * エネルギーロスが増大(グリップ性能向上)



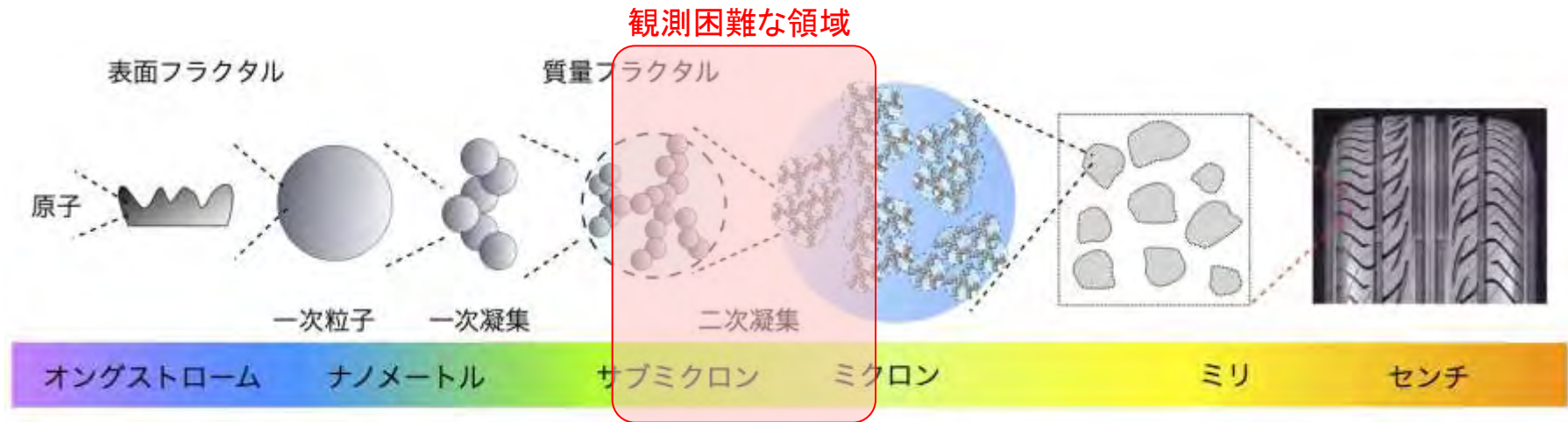
相反性能

燃費性能の低下

シリカ製ナノ粒子を用いることで
『燃費性能』・『グリップ性能』を
経験的に両立可能

新材料創出・物性コントロールするためには...
ナノ粒子による特異な性質の解明が重要

4 明らかにすべきこと



- ❖ 幅広いスケール領域におけるナノ粒子階層構造の把握
- ❖ ナノ粒子階層構造モデルを構築しシミュレーションによる物性発現メカニズムの解析
- ❖ ナノ粒子とポリマーとの結合様式や相互作用の影響

⇒ ナノ粒子階層構造変化・界面ポリマー挙動変化による物性への影響



先端大型研究施設『SPring-8』と『地球シミュレータ』の活用

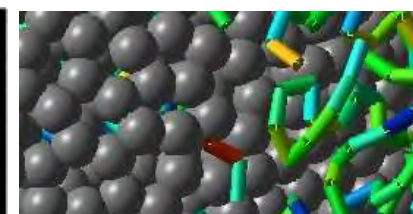
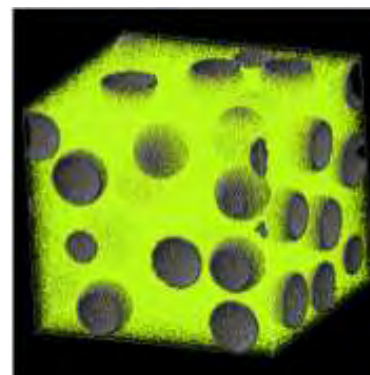
5 先端大型研究施設を利用した材料研究

SPring-8 ナノ構造解析技術を2004年に開発（二次元極小角X線散乱法, 2D-USAXS）



融合

地球シミュレータ ゴム内部の変形・分子挙動の解明技術（2005年開始）



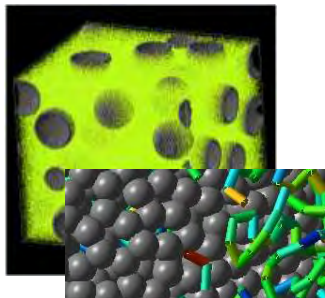
6 研究戦略

SPring-8 ナノ構造計測技術



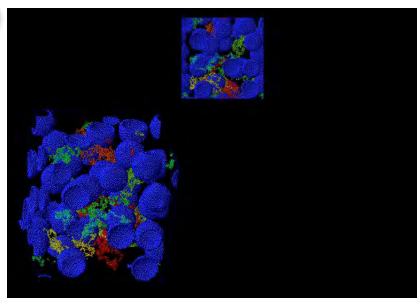
ナノ粒子界面制御による効果の確認

ナノ粒子界面特性と物性解析
(大規模粗視化MD法開発)



2009~10年

ポリマー分子挙動・物性解析
(大規模粗視化MD法開発)

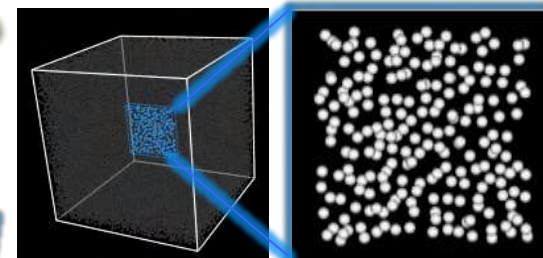


2007~8年

新材料創出
物性コントロール

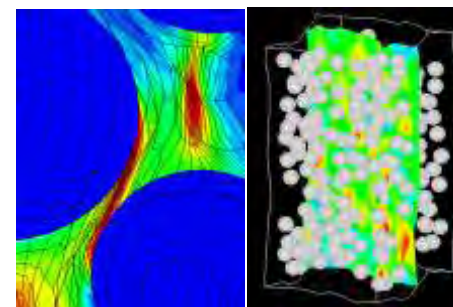
2005~6年

ナノ粒子の三次元構造モデル構築
(二次元リバースモンテカルロ法開発)



2006年

エネルギーロス発生箇所・応力伝播
(大規模非線形FEM解析)



7 研究のタクティクス（具体的な実施事項）

アプリケーションソフトウェアの革新（開発）

- ❖ ゴム材料の複雑で多様な現象の系全体のシミュレーション
高分子物理学に基づく、粗視化MD模型の活用と
系統的な有効性検証（データ同化による粗視化模型の構築）
- ❖ SPring-8実験のデータマイニング（逆問題解法）の適用
フィラーの3次元配置を推定する逆モンテカルロ法と、
FEMや粗視化MDとの連動（観測に基づくフィラー配置のデータ同化）

 ESを活用した大規模計算で初めて
現実にあう(規模の)計算が可能になった。

 『「知的ものづくり」・「科学的未来設計」
の実問題の適用』を実践

- ❖ 一連の成果を受け、研究技法の高分子材料産業分野へ波及
- ❖ 既存のFEM計算では困難なフィラー界面効果の研究が可能に

8 2005-2006年度の検討内容・結果 ①

Reverse Monte Carlo 法 (RMC法)

コンピュータ上で空間にランダムに配置した粒子を
散乱像に合うように動かしモデルを構築する方法

従来のRMC

統計的に等方的な構造

1次元散乱強度 → PCで処理可能

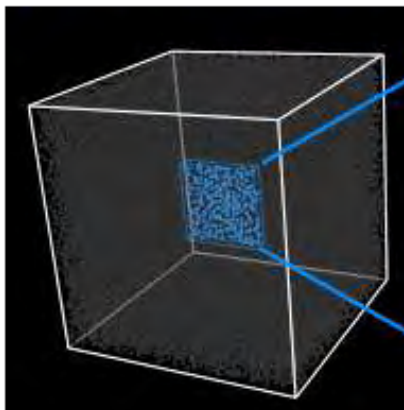
延伸ゴム

異方的な構造

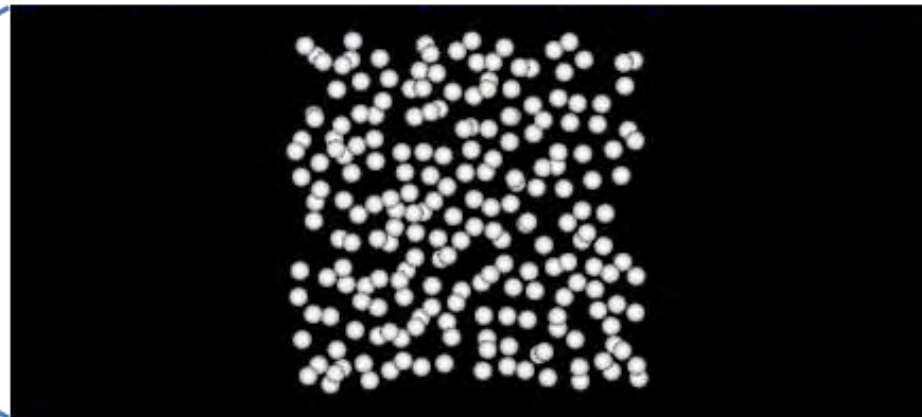
2次元散乱強度 → 大規模計算

ES利用による『2Dp-RMC開発』

2Dp-RMCで得られたモデル



延伸過程のフィラー挙動 (2D-RMC計算結果の一部を表示)



K. Hagita, et. al., J. Phys.: Condens. Matter, 19, 330017 (2007).
K. Hagita, et. al., Rheol Acta (2008) 47: 537

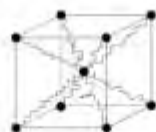
- ❖ シリカ製ナノ粒子の三次元構造モデルの構築に成功
- ❖ 延伸時におけるナノ粒子の挙動の解析

9 2005-2006年度の検討内容・結果 ②

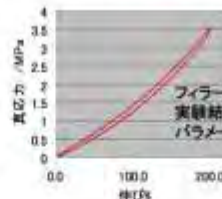
歪み分布 (1部のみ表示)



○ポリマー: 超弾性+粘弾性モデル



Arruda-Boyceモデル
(1993)



フィラー未充填ゴムの
実験結果からモデル
パラメータを同定

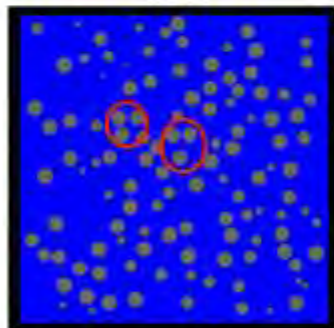
○フィラー: 弾性体モデル(ゴムの1000倍の弾性率)

※ポリマー/フィラー界面は結合
周期境界条件を適用

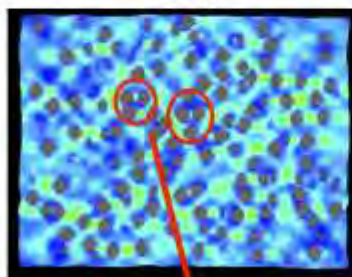
内藤正登, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム(2007)特別賞

任意の面での歪み分布

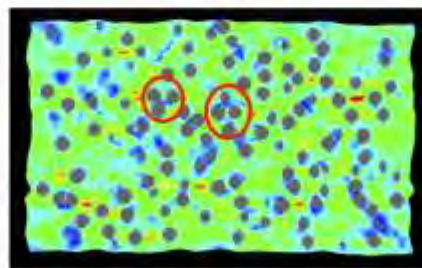
0 %



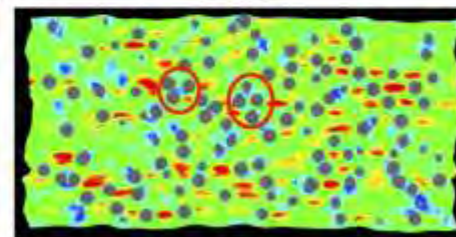
20 %



40 %



60 %

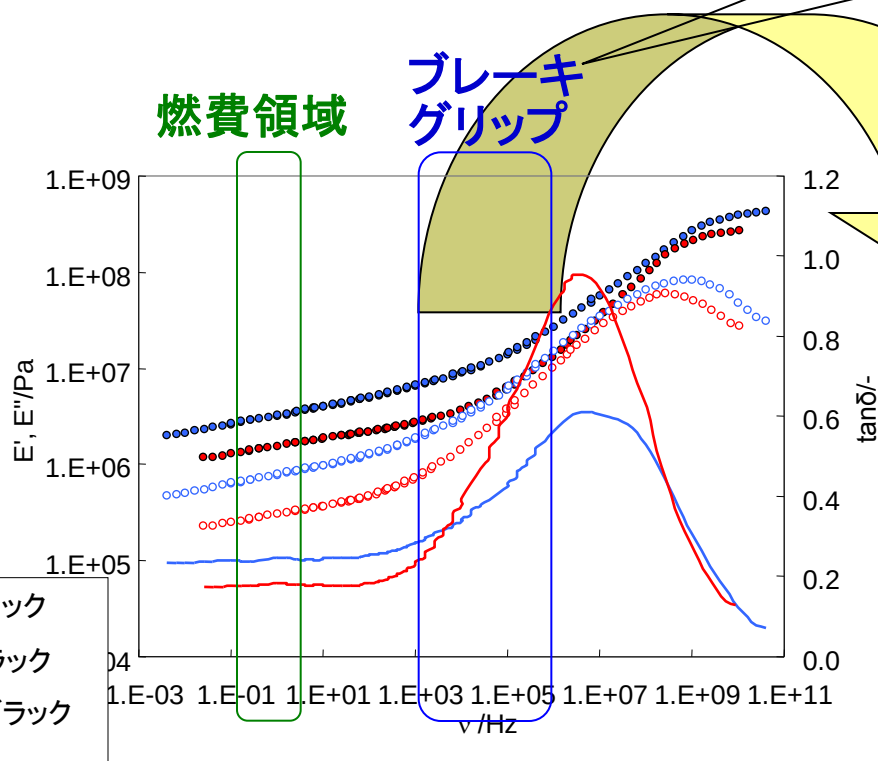


フィラー位置が変化しないクラスターの存在 → 見かけのフィラー体積分率を増大

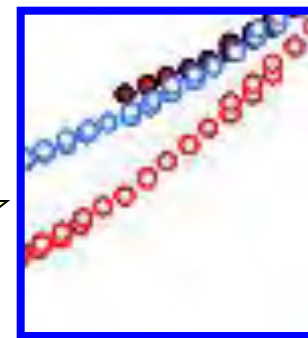
- ❖ ゴムの変形解析から応力集中する部分の特定
- ❖ フィラー階層構造による応力伝播の様子を解析

10 低燃費性能とグリップ性能を両立させるには

ブレーキ性能・グリップ性能(安全安心)は、ゴムの動的変形時のエネルギーの損失(損失弾性率: E'')で決まる



(ポイント)
現在、粗視化MD法でアプローチできる
時間周波数領域



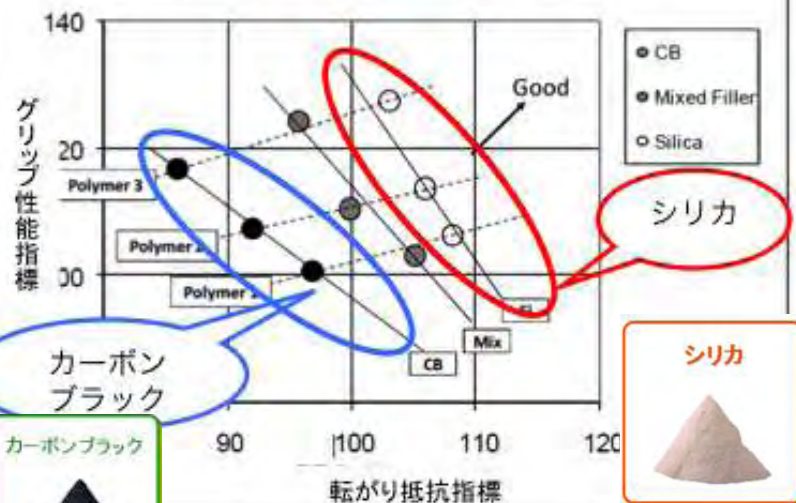
この領域の E'' を上げたら
高性能なタイヤを作ることができる。

弾性率の比 $\tan\delta (=E''/E')$ は 性能を示す指標

11 分子レベルで解明する重要性 ～ナノ粒子界面～

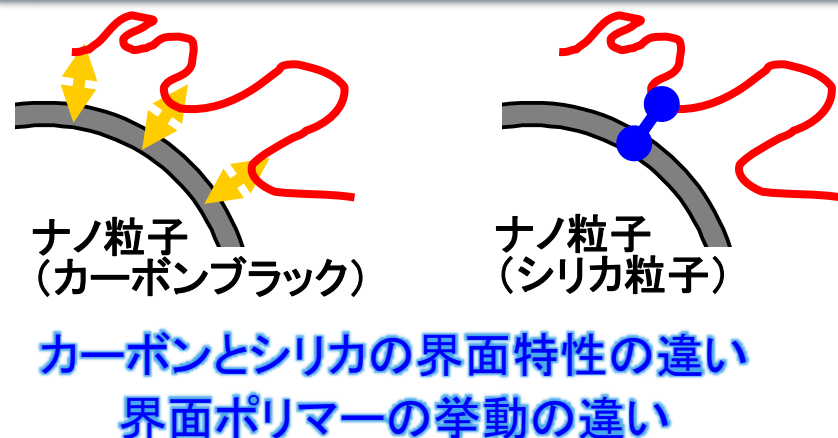
最近のタイヤ材料技術

グリップ性能指標と転がり抵抗指標



カーボンからシリカに変えると
転がり抵抗とグリップ性能が改善

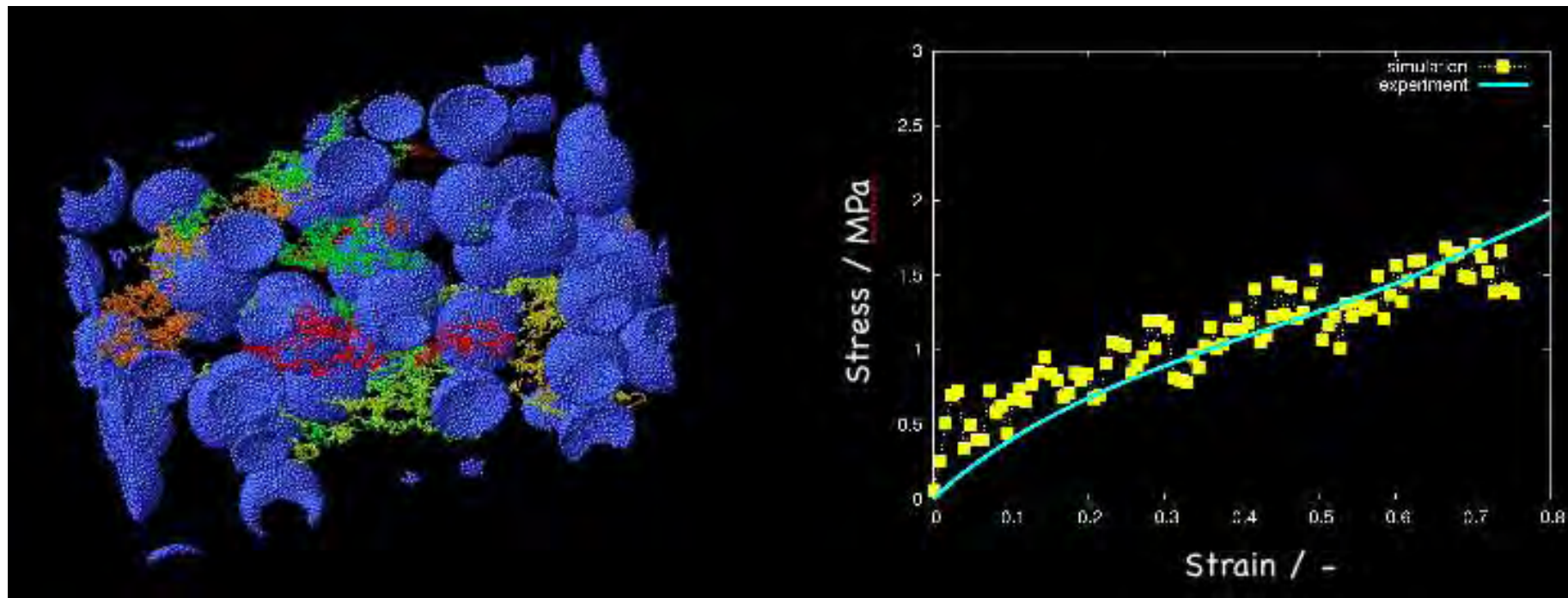
カーボンブラックとシリカの界面



ナノ粒子界面の特性が変わった場合

- * 粘弾性特性にどのように影響を与えるのか？
- * 界面で何がおこっているのか？

大規模粗視化MDシミュレーションの実施

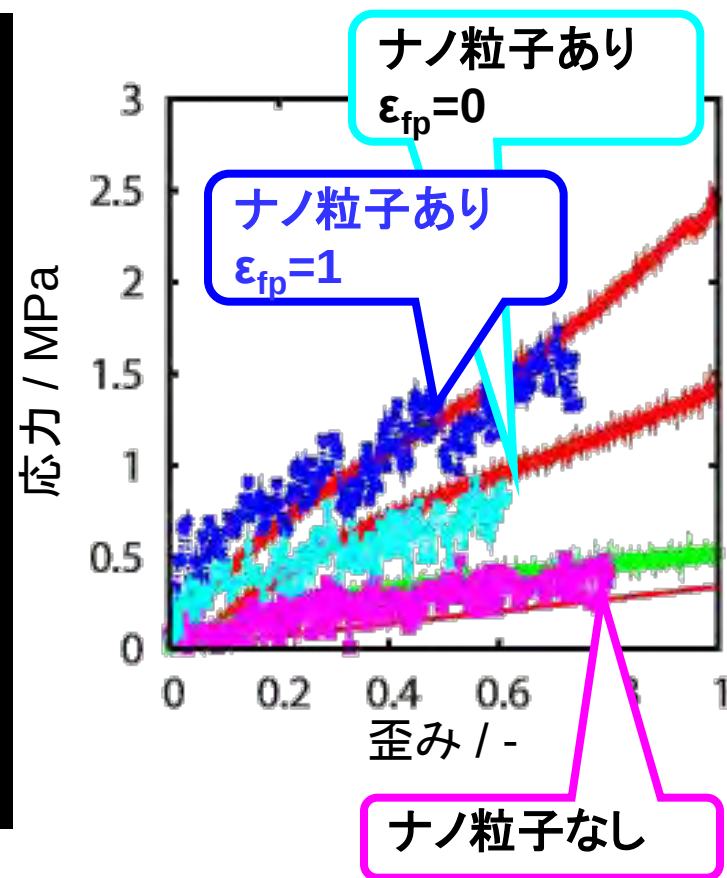
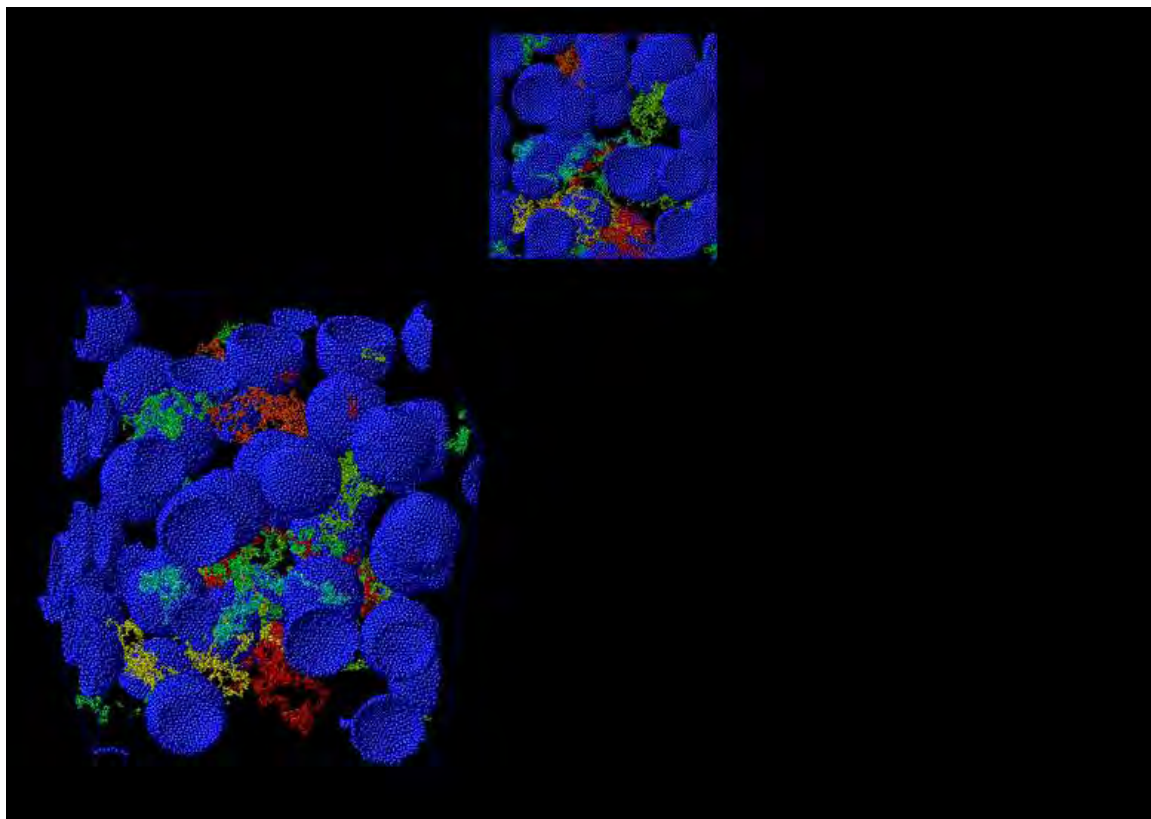


萩田克美, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム(2008) 優秀賞

大規模化により実験のS-S曲線を再現できタイヤゴムの特徴を
精度よく表現できるようになった !!!

13 2007-2008年度の検討内容・結果

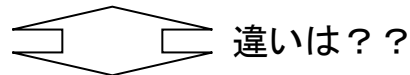
大規模粗視化MDシミュレーションの実施



- ❖ 応力-歪み 関係の再現が可能
- ❖ ポリマーとナノ粒子の相互作用で 応力-歪みの関係が変化

14 2009～2010年度の検討内容・結果

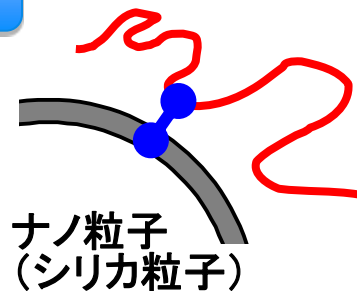
低燃費型タイヤゴム材料(シリカ配合)



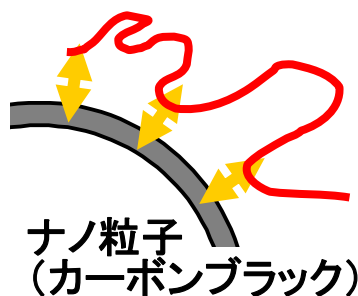
従来型タイヤゴム材料(カーボンブラック配合)

分子構造

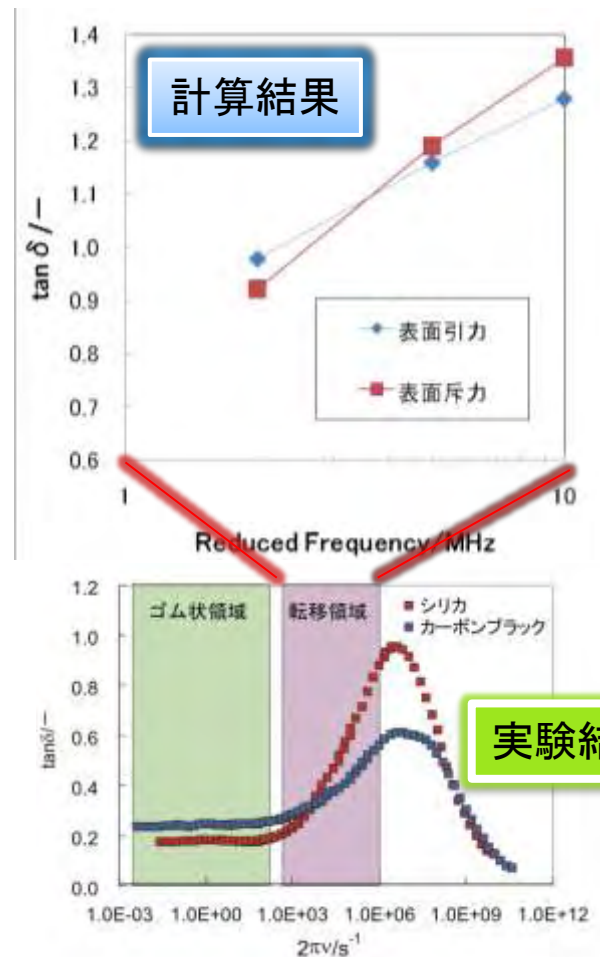
低燃費型
タイヤ
ゴム材料



従来型
タイヤ
ゴム材料



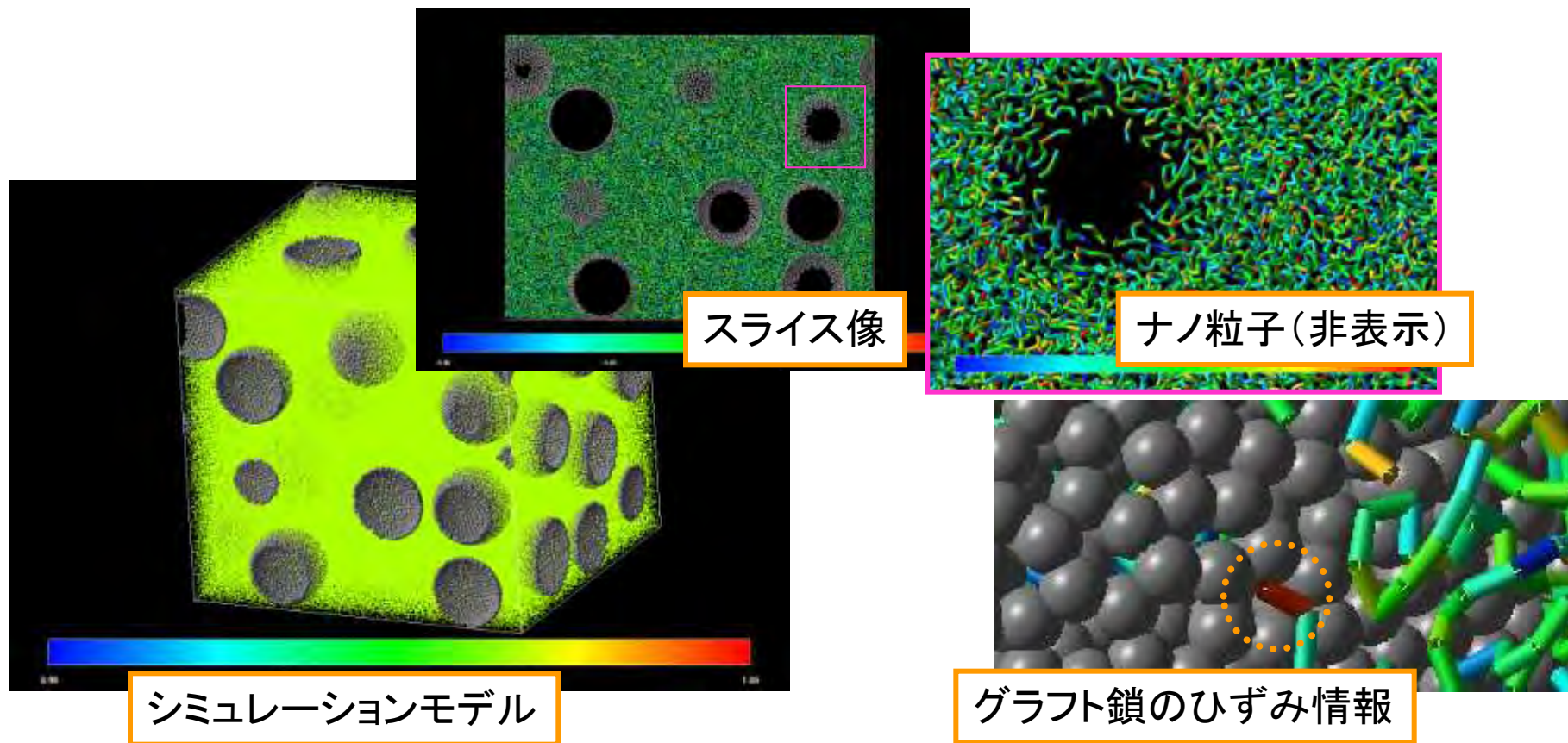
粘弾性への
影響



実験結果と比較すると今回のシミュレーションでは転移領域の挙動が再現

⇒ タイヤゴムを粗視化模型が現実を再現していることを期待

15 ナノ粒子界面ポリマーの可視化



粗視化MDシミュレーション結果を可視化することで

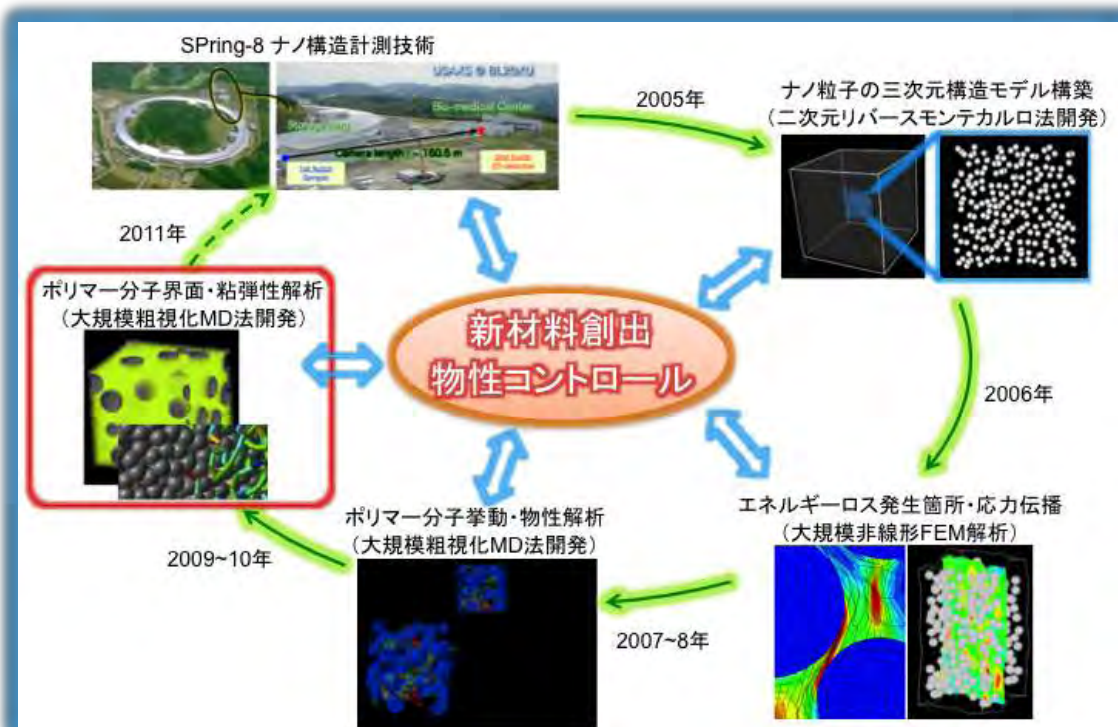
- * 実験では得られない局所的な挙動の把握
- * 空間的な挙動の相関

16 まとめ

低燃費タイヤ用ゴム材料を開発するために

アプリケーションソフトウェアの革新を実践

- * 先端大型研究施設を融合
- * ゴム中の階層構造が生み出す複雑な物理を解明できる基盤の構築
- * 様々な分子をコントロールすることで新材料・物性コントロールを目指す



課題解決型での
スパイラルアップ



国際競争力の向上

『環境に優しくより安全に』

17 産業推進制度について

❖ 未来(5年後程度先;夢)の開発技術につながるR&D
技術の創出への支援を (産学連携)

❖ 夢が持てる未来志向の大規模計算への支援を

国際競争力、差別化の指向、分野先導、未来の提示

❖ スパコン利用支援への期待 (多様な使い方への対応)

- ・プロダクトrun的産業利用(実務)

 - 基本は、会社で調達。 急な需要調整のニーズあり。

- ・ブレークスルー的産業利用(課題解決;次世代技術)

 - 国際競争力、分野先導

- ・将来技術探索的産業利用(チャンピオンデータ)

 - 未来の可能性提示、研究の方向性

▼「京」コンピュータでも、演算能力の他に、
世界最大の「分散メモリ」、「ノード間インターコネクト」、
「分散IOノード」を活用した個性的な計算も可能。

- ❖ 2005年～2006年 文部科学省 地球シミュレータ戦略活用プログラム
- ❖ 2007年～ 地球シミュレータ産業戦略利用プログラム
- ❖ 北海道大学 情報基盤センター
- ❖ 先端研究施設共用イノベーション創出事業【産業戦略利用】（名古屋大学）

❖ リバースモンテカルロ法（およびSPring-8実験）

防衛大 萩田講師、荒井教授、東京大学 篠原助教、雨宮教授
（学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募研究）

❖ 大規模有限要素法計算

神戸大学 富田教授

戦略的な産学連携で

アプリケーションソフトウェアの革新を実践

❖ 粗視化分子動力学法

防衛大 萩田講師、産総研 森田主任研究員、慶大 高野教授、東大 土井教授
学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募研究