

平成19年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム利用課題報告

2008年9月5日(金)

戦略分野利用推進

申請プロジェクト名

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ー

プロジェクト責任者

住友ゴム工業株式会社

皆川 康久

萩田 克美*1、皆川 康久*2、尾藤 容正*2、吉永 寛*2、数納 広哉*3、上原 均*3、新宮 哲*3、
大宮 学*4、高野 宏*5、森田 裕史*6、土井 正男*6

*1 防衛大学校 応用物理学科

*2 SRI研究開発株式会社 (H20.4より住友ゴム工業株式会社 研究開発本部へ会社組織変更)

*3 独立行政法人海洋研究開発機構

*4 北海道大学 情報基盤センター

*5 慶應義塾大学 理工学部 物理学科

*6 東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻

内容

- 1.会社紹介
- 2.当社のこれまでのシミュレーションへの取り組み: デジタイヤ
- 3.プロジェクト概要
- 4.利用目的
- 5.これまでのSPring-8及び地球シミュレータの利用
- 6.平成19年度からの利用目的
- 7.大規模粗視化分子動力学法の想定スケール
- 8.地球シミュレータ利用計画
- 9.プロジェクト体制
- 10.本年度の成果
- 11.本年度の成果の詳細
- 12.平成19年度の成果
- 13.将来の展望
- 14.平成20年度の地球シミュレータ利用計画
- 15.当社の目指す最終目標

1.会社紹介：住友ゴム工業株式会社の概要



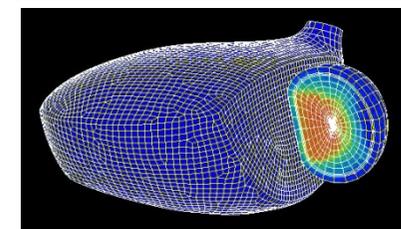
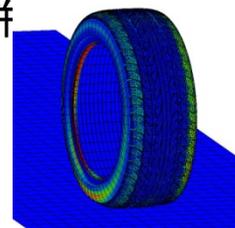
沿革

- 1909年 Dunlop Rubber Co.(Far East)LTD 日本支店を神戸に設立
- 1926年 研究室発足
- 1937年 日本ダンロップ護謨(株)に社名変更
- 1963年 住友ゴム工業株式会社に社名変更。
- 1972年 研究開発部発足
- 1995年 タイヤ技術本部より基本技術研究室を編入
- 1996年 新設技研センターに移転
- 2003年 住友ゴム工業(株)より分社、SRI研究開発(株)として設立
- 2008年4月 SRI研究開発(株)を住友ゴム工業(株)が合併



事業内容

- ・タイヤの製造販売



デジタルインパクトテクノロジー
“デジタイヤ”
デジタルローリングシミュレーション

LE MANS
LM703

特殊吸音
スポンジ



97%石油外天然資源タイヤ

ENASAVE 97
エナセーブ キュウジユウナナ

石油外資源
97%使用



SRIグループ組織概略図



住友ゴム工業(株)
[グループ本社機能]
[タイヤ事業]

資本金: 42,658百万円
従業員数: 約4,700名

SRIスポーツ(株)
[スポーツ事業]

資本金: 6,500百万円
従業員数: 約250名

SRIハイブリッド(株)
[産業品事業]

資本金: 2,500百万円
従業員数: 約350名

機能会社

- ・ SRIビジネスアソシエーツ(株) / 人事庶務・研究補助作業
- ・ SRIシステムズ(株)

タイヤ販売会社

- ・ ダンロップファルケンタイヤ(株)
- ・ SRIタイヤトレーディング(株)
- ・ 日本グッドイヤー(株)
- 他

従業員数 連結16,737 人
 タイヤ事業 11,389 人
 スポーツ事業 1,449 人
 産業品事業他 3,509 人
 全社(共通) 390 人

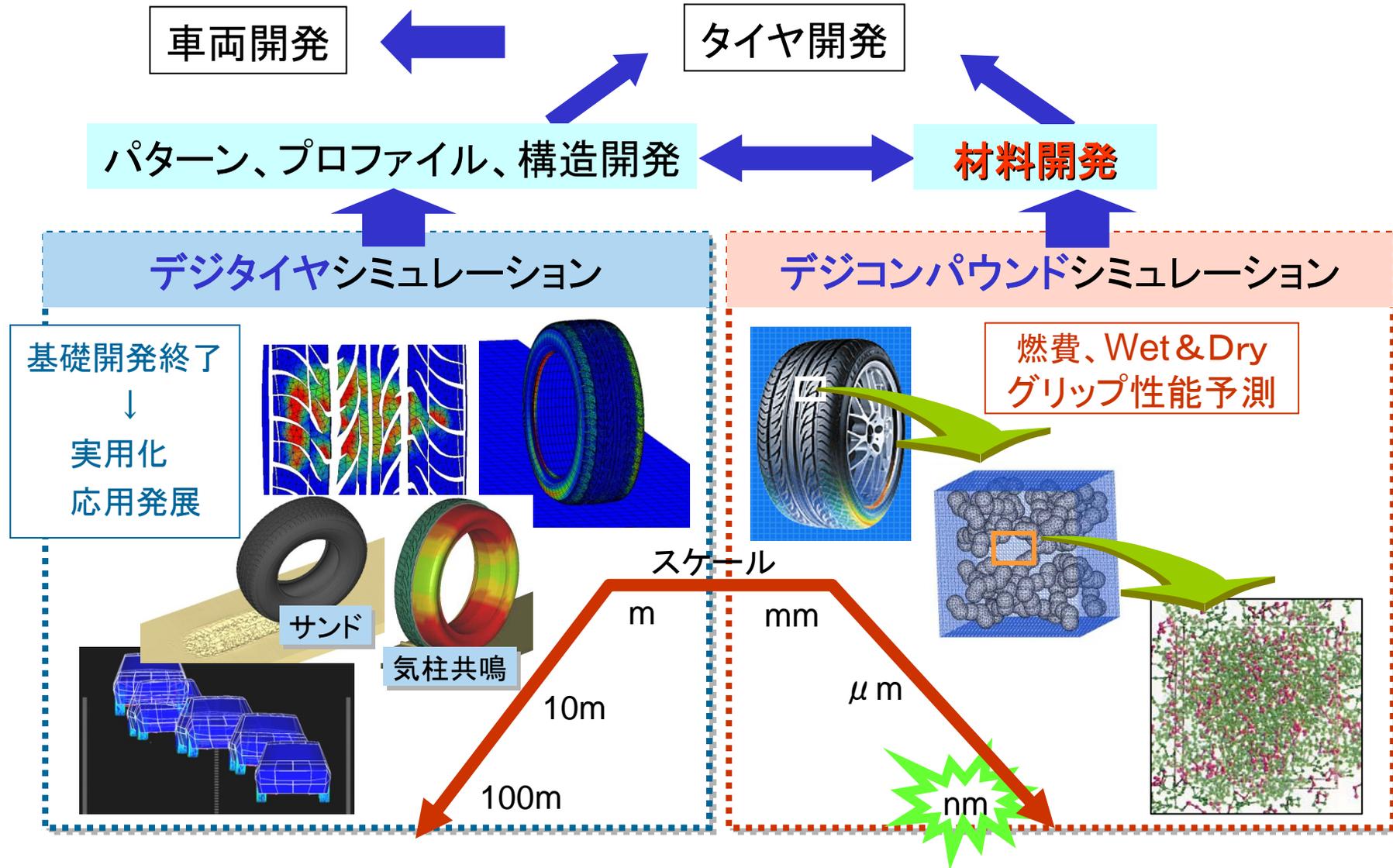
*臨時従業員3,500人含まず

2. 当社の今までのシミュレーションへの取り組み: デジタイヤ

住友ゴムグループ



ナノレベルの材料設計から車両走行まで一貫したシミュレーション開発



3.プロジェクト概要



プロジェクト名: 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

背景: タイヤは車の燃費の約20%を担っている

→ 我が国のCO₂排出量の約3%

→ 「低炭素社会づくり」の観点から

大幅な**低燃費化**が、今後強く求められる

同時に、更なる**安全性(高グリップ)**への要求



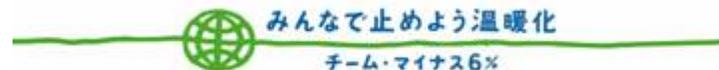
* 背反性能の高次元での両立を達成することが急務

目的: 革新的技術の開発による

『環境負荷を低減した(低燃費)かつ高性能(高グリップ)タイヤ』の開発

「美しい星50 (Cool Earth 50)」

革新的技術の開発 低炭素社会づくり



プロジェクトの必要性:

過去タイヤ業界は、経験ベースでカーボンブラックからシリカという
ナノフィラーへの転換により、低燃費性と高グリップの両立を一応達成した。

しかし、現在求められる要求性能は、過去達成した性能を遥かに
超えるもの(当社2015年目標:燃費の50%削減、グリップ10%向上)

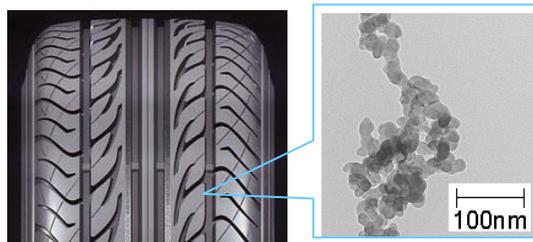


図1 タイヤ中に分散させた
カーボンブラック

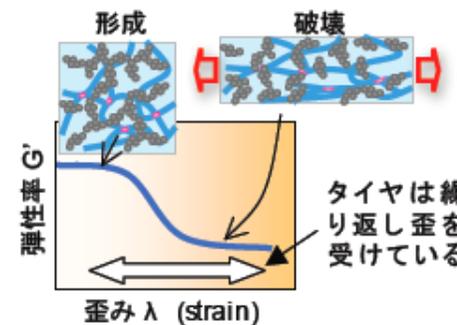


図2 ナノ粒子配合ゴム特有の
現象 (Payne効果)

4.利用目的



環境対応高性能タイヤを開発するためのナノ粒子のネットワーク構造解明およびその物性特性解明の計算

ナノフィラーのゴムへの配合

→ゴム強度の増加・繰り返し変形時のヒステリシスロス(グリップや転がり抵抗に關係)の増加

→メカニズムが未だにはっきりしていない

→ゴム中に形成された階層的フィラー構造が発生期限ではないか？

→このメカニズムを大規模粗視化分子動力学法で解明したい

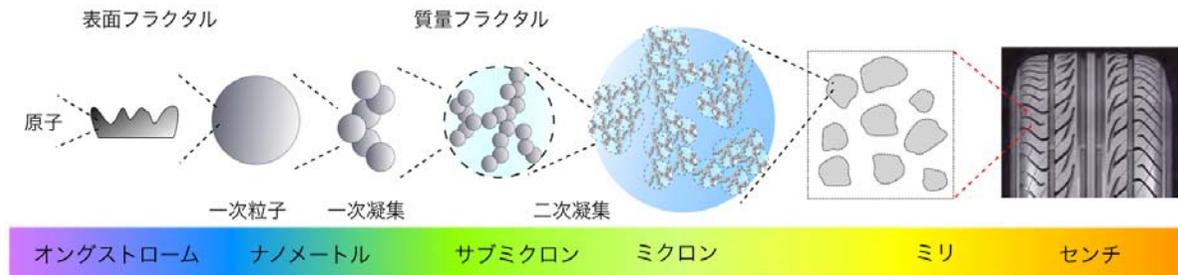


図1 ゴム中の階層的なフィラー凝集構造のモデル図

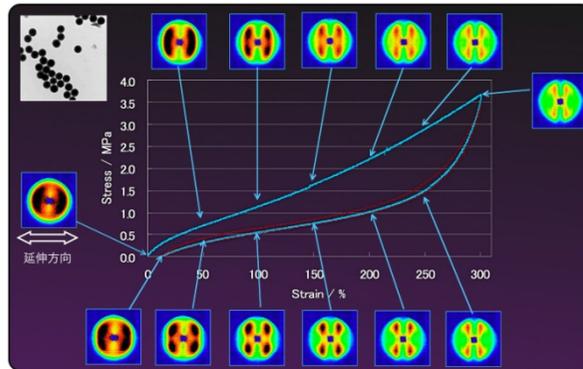
5. 今までのSPring-8及び地球シミュレータの利用



* 平成17・18年度の文部科学省 戦略活用プログラムのもの

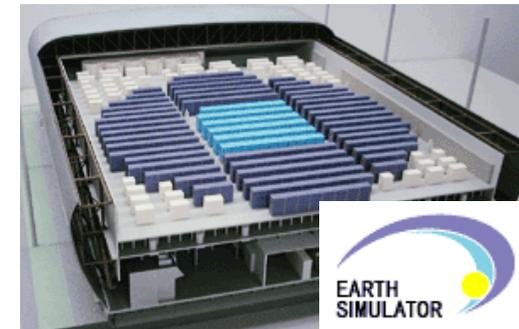
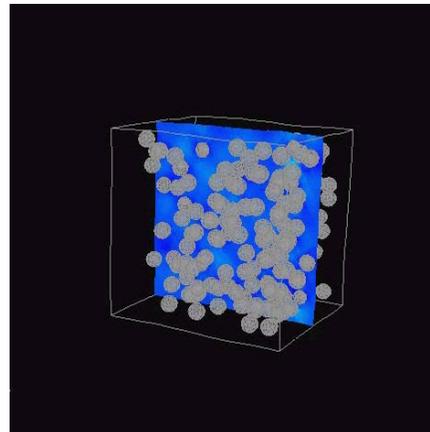
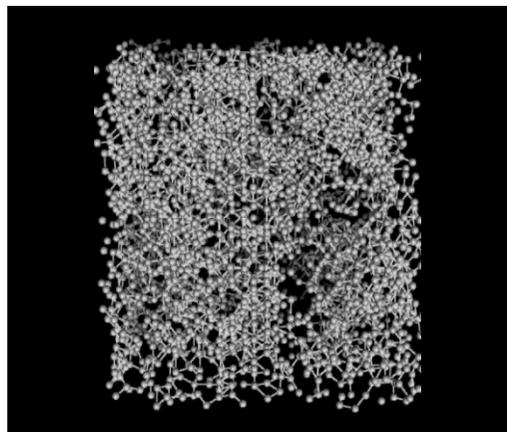
SPring-8: 時分割2次元極小角X線散乱測定

ナノ粒子の応力-歪み曲線に対応した散乱パターン像の取得



地球シミュレータ: 2次元パターン・リバースモンテカルロ法計算

ナノ粒子ネットワークの3次元実空間像の取得→大規模FEM計算



6.平成19年度からの利用目的



文部科学省先端イノベーション創出事業

「地球シミュレータ産業戦略利用プログラム」のもと

ゴム中に形成された階層的フィラー構造によるエネルギーロス発現メカニズムの解明を分子動力学法を駆使して行う

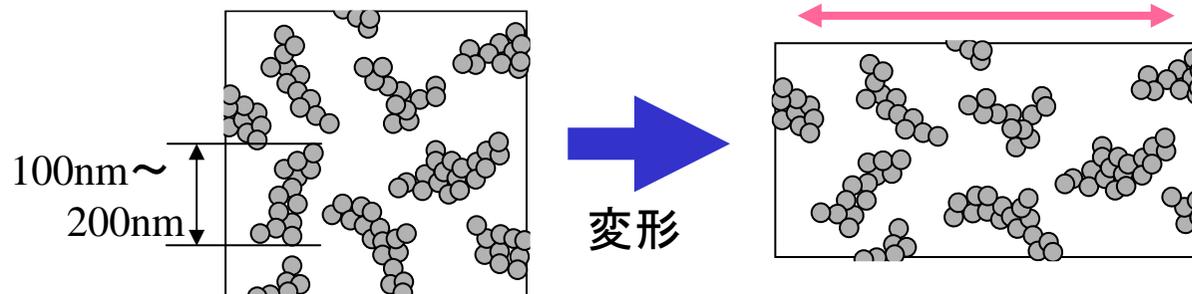
→ナノフィラーのスケール:約100~200nm

高分子のモノマースケール:約1nm

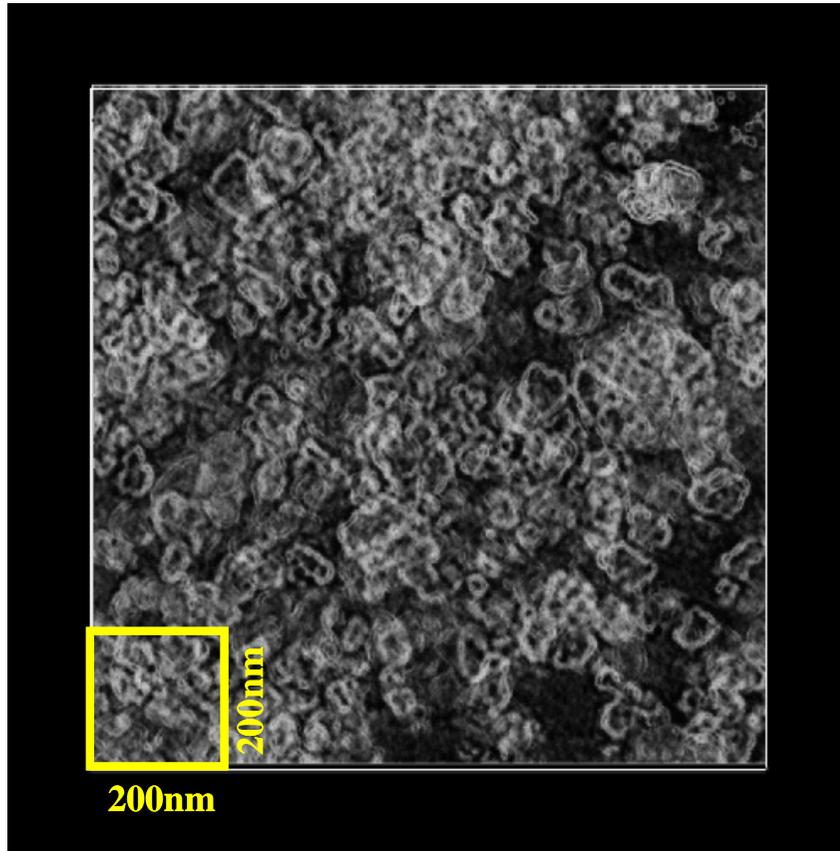
* マルチスケールな系の大規模な粗視化分子
動力学シミュレーションによる解析

→マルチスケール系のシミュレーション
コードは存在しない

→地球シミュレータの利用により効果的効率的に
コードの試作・検証を行いたい



7. 超大規模粗視化分子動力学法の想定スケール



実際のゴム(カーボンブラック 40phr)の
3D-TEM像

カーボンブラックが**数から十個入る空間**

→ 200^3nm^3

この空間中の粒子数

原子総数(ポリイソプレン)

約8億個

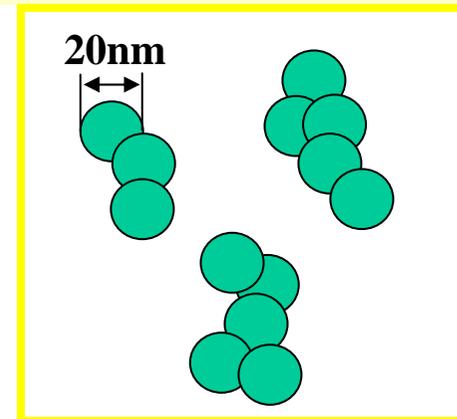
粗視化した場合(イソプレン単位で粗視化)

約6400万個

想定スケール

200^3nm^3 で約1億個の粒子の計算

→地球シミュレータでしか計算できない
(メモリ及び計算速度の点から)



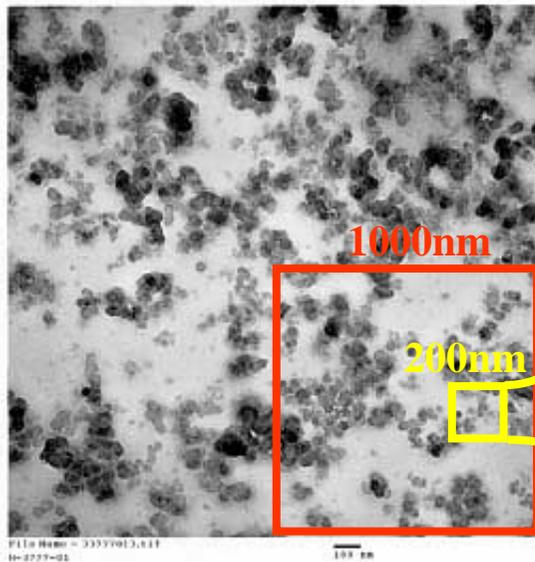
200nm

8.地球シミュレータ利用計画

平成19年度の計画

約1億個以上の粒子が扱える粗視化分子動力学シミュレーション及びフルアトムシミュレーションプログラムの開発

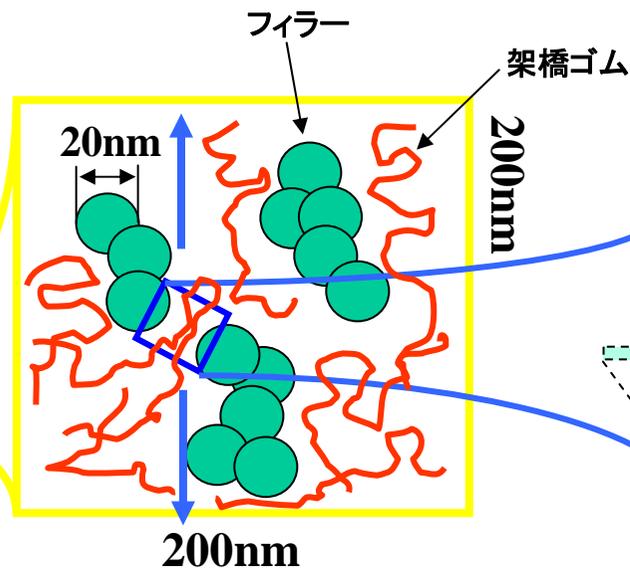
実際のゴム → 地球シミュレータレベル → パソコンレベル
(フィラーの分散状態の最適化) (フィラー形状の最適化) (ゴムの挙動)



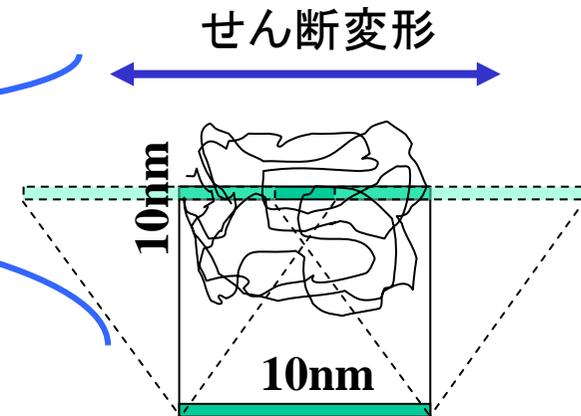
TEM像:カーボンブラック30phr

目標粒子数:1000億個

* 次世代のスパコン
(ペタコン)に期待

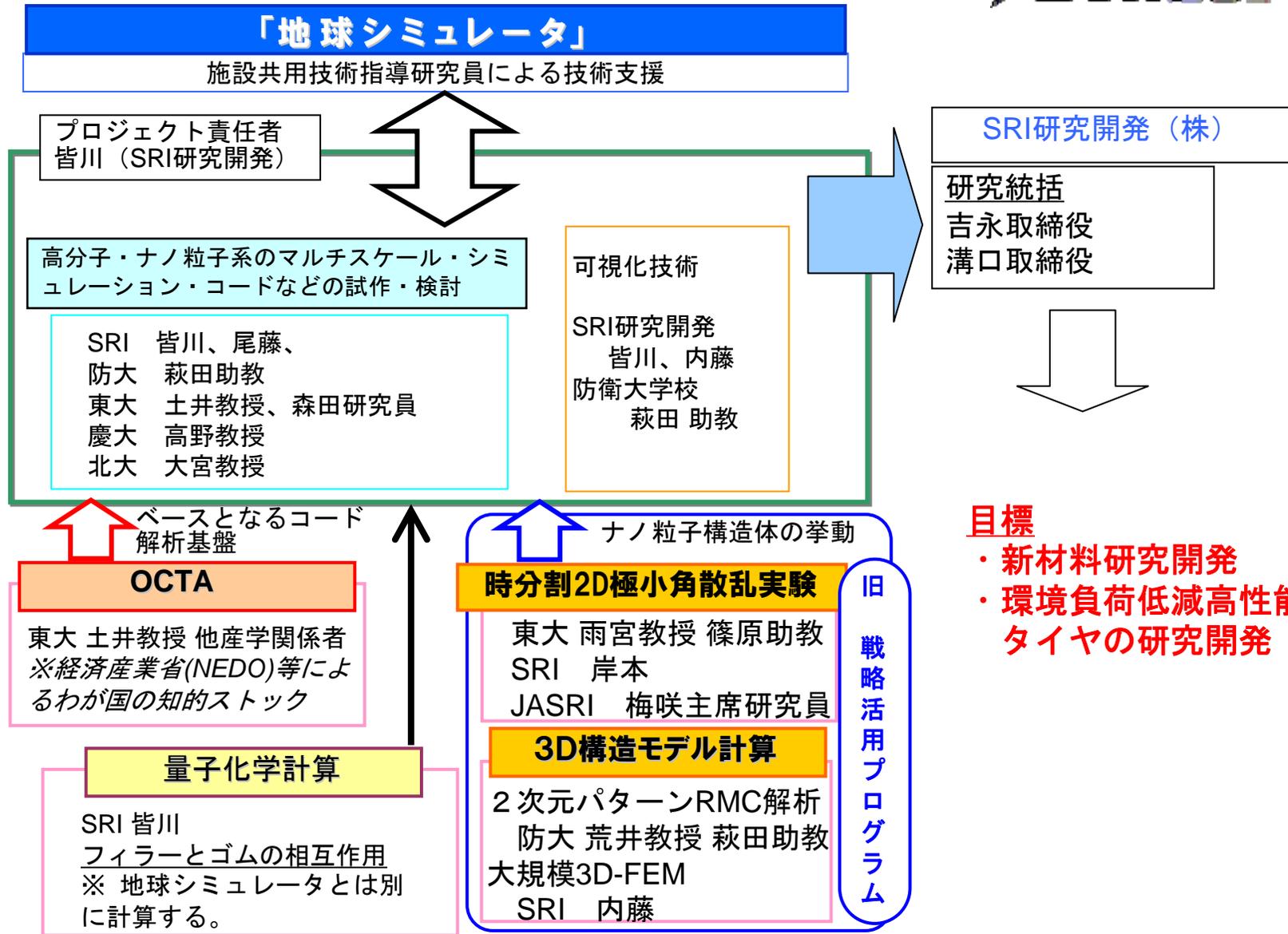


数億個



数万~数十万個

9.プロジェクト体制



- 目標**
- ・ 新材料研究開発
 - ・ 環境負荷低減高性能
タイヤの研究開発

10.本年度の成果

平成19年度の成果



●開発

- ・調査および設計： 東大土井、森田、慶大高野、防大萩田、北大大宮、SRI関係者
- ・コーディング： 防大 萩田、SRI 尾藤、（慶大高野、北大大宮）

●成果

- ・バネ-ビーズモデルで1億3千万粒子のMDコードの完了
- ・バネ-ビーズモデルのフルアトム化への拡張（各原子情報、アングルポテンシャル・トーションポテンシャル、LJの引カポテンシャルの追加等）のコード作成

11.本年度の成果の詳細



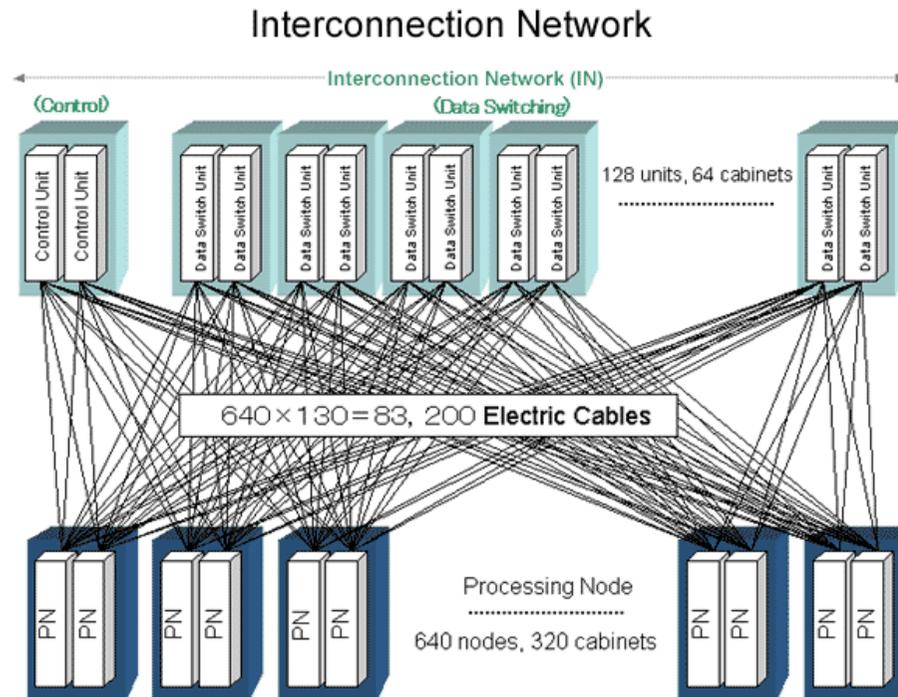
並列化の考え方

従来の並列化

- ・すべてのノードで共通のファイルの入出力

我々の方法

- ・分散入出力による超並列コードの実装



超並列の実装: 粒子間の相互作用だけでなく、高分子に沿ったつながり相互作用の領域分割

→ 太枠の領域に対して破線の「のりしろ」の粒子情報の1MDステップごとの通信

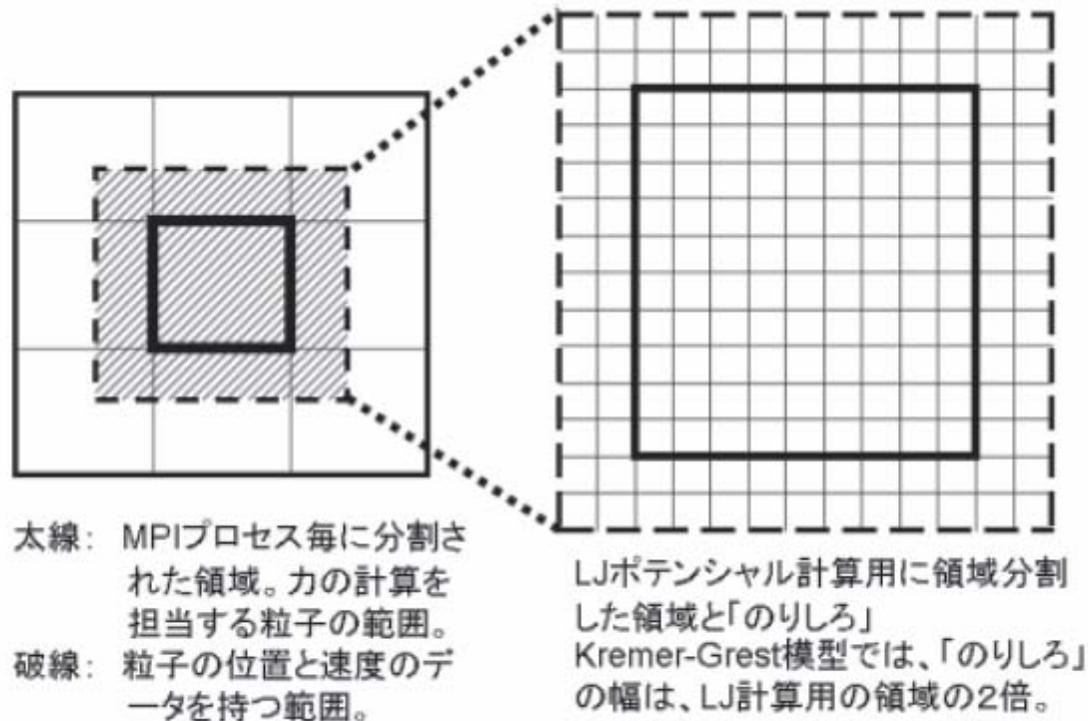


図3 領域分割された領域とのりしろのイメージ

12.平成19年度の成果



フィラーを含まない高分子メルトのMDシミュレーション結果

表1 ノード数限定解除申請のために計算した結果

模型	Kremer-Grest 模型		フルアトム模型 (NVT)	
粒子数	約 1 億 3 千万		800 万	
MD ステップ数	2500		500	
利用ノード数	512	64	125	27
MAINLOOP の計算時間 (秒)	393.806	2763.427	160.085	706.118
ベクトル化率	96.37%	95.32%	98.51%	98.16%
総利用メモリ (GB)	3026.8	1071.9	688.0	246.3
並列化率 α	99.9960%		99.9936%	
最大プロセッサ数	25080.7		15595.7	
最終許可ノード数	512		125	

比較的よい並列化効率を示した

SPring-8とスパコンを組み合わせた次世代タイヤ材料の開発スキーム

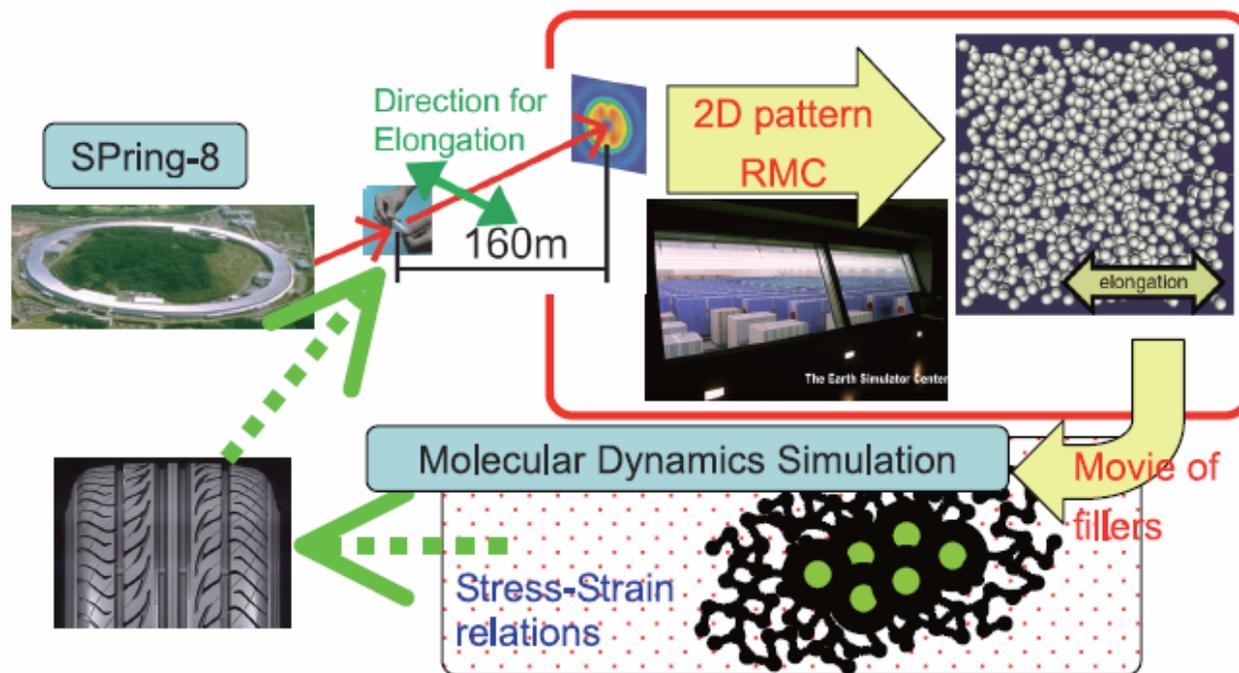


図4 SPring-8 実験とシミュレーションのタイヤ開発への活用イメージ

次世代デジタルエンジニアリング

今後の課題(平成20年度の活動)

プログラム開発

フィラーの混在した系での粗視化分子動力学シミュレーション

***高分子とナノ粒子の混在系の大規模フルアトムシミュレーションコードの開発の完成**

*量子化学計算より高分子とナノ粒子の相互作用の検討

*微小変形(最大ひずみ:0.5)へのコードの対応

*フィラーの形状の最適化

課題

フィラーが入ることによるインバランスを如何に解消する様プログラムを開発することにある。でないとならばフィラーのあるところと無いところの粒子数の違いによるインバランスによる計算の待ち時間の増加を招いてしまい、速度UPが出来ない。

15.当社の目指す最終目標



ゴムとナノ粒子の混在系での超大規模粗視化分子動力学シミュレーション手法を開発することで

→**2015年に転がり抵抗を50%低減させたタイヤ材料の開発**を行う。

→開発したコードは将来的に公開する。日本から世界への情報発信を行い、世界をリードしていきたい。

→「地球シミュレータ」・「SPring-8」などの我が国の先端研究施設を有機的に連携利用して、ゴム材料からタイヤ形状も含めたタイヤ全体の物性挙動のシミュレーションを行い、世界最高の「環境負荷を低減した高性能タイヤ」の開発を目指す。

謝辞

大規模粗視化分子動力学法の超並列コード作成にかかる基礎的な検討に関し、
東京大学 物性研究所、北海道大学 情報基盤センター、自然科学研究機構
岡崎共通研究施設計算科学研究センターのスーパーコンピュータを利用させて
いただきました。ここに感謝の意を記します。

ファイラー構造の時分割二次元極小角X線散乱法による測定、2次元パターン・リバー
スモンテカルロ解析、大規模有限要素法計算に関しては、
文部科学省 戦略活用プログラムの支援に感謝するとともに、東京大学大学
院 新領域研究科 雨宮教授、篠原助教、防衛大学校 荒井教授、JASRI
梅咲主席研究員、住友ゴム工業 岸本氏、内藤氏に厚くお礼申し上げます。