

京コンピュータ・シンポジウム
2013年5月13日
東京・イイノカンファレンスセンター

京を利用した大規模分子 シミュレーションによるタイヤ材料開発

住友ゴム工業株式会社
常務執行役員
中瀬古広三郎

1 自動車・タイヤを取り巻く社会動向とタイヤに求められる性能

2 タイヤ開発のためのシミュレーション技術活用の歴史

3 タイヤ材料シミュレーション

4 京スパコンを用いた大規模分子シミュレーション

住友ゴムグループ紹介

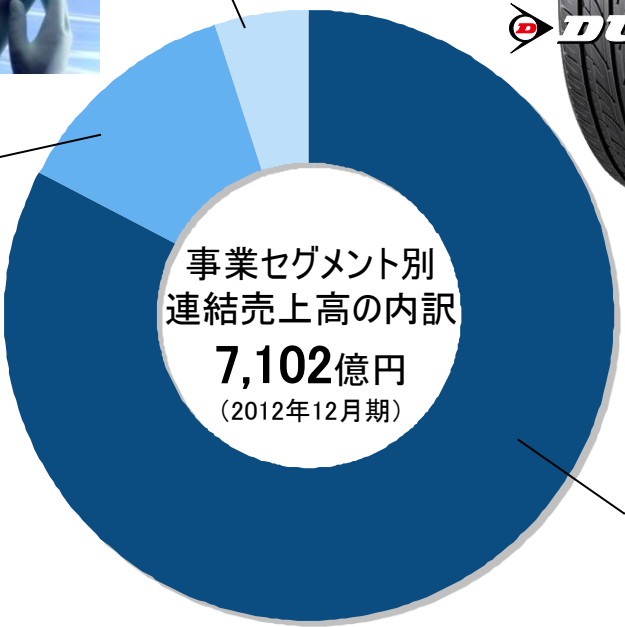
住友ゴム工業株式会社



産業品・その他事業
4.2% (295億円)



タイヤ事業 87.2%
(6,194億円)



事業セグメント別
連結売上高の内訳
7,102億円
(2012年12月期)

スポーツ事業
8.6% (613億円)
ダンロップスポーツ株式会社



住友ゴムグループ

自動車・タイヤを取り巻く社会動向

政治

低燃費車優遇税制
排ガス規制
北米タイヤ安全規則
スペアレス

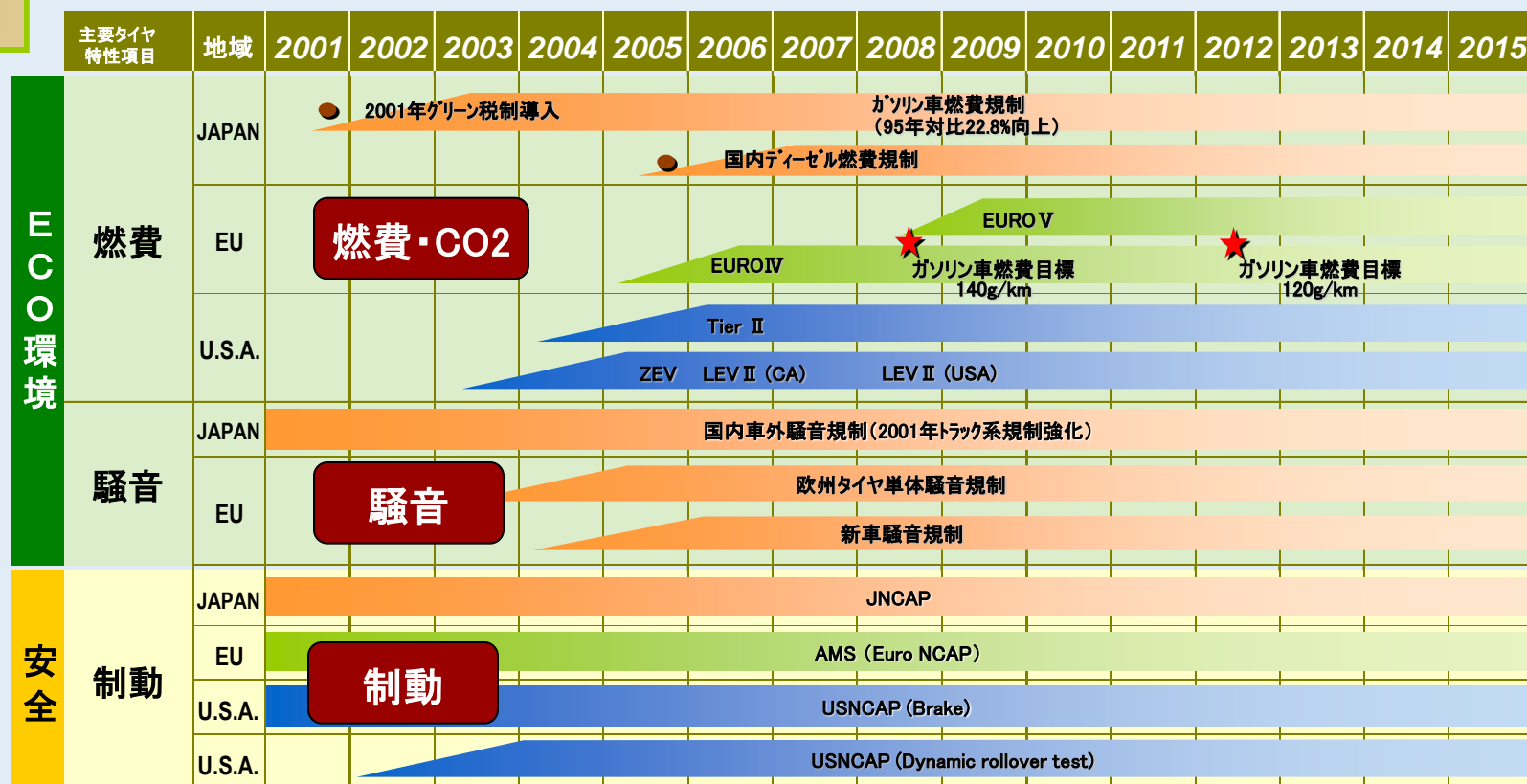
経済

新興国：自動車の増加
原油・原材料の高騰
自動車生産の現地化

環境

地球温暖化
CO2排出規制
HV車からEV車

規制



その他、スペアタイヤレス・ガイドライン(99年運輸省)、TREAD法(米国、空気圧警報装置義務化)



環境問題への対応：CO2削減 ～自動車・タイヤでの事例～

自動車関連でのCO2削減の為の規制事例

地域	自動車の燃費・CO2排出
欧州	CO2排出目標（'06年160 ⇒ '12年120g/Km）
日本	車両燃費目標（'10年15.1 ⇒ '15年16.8Km/L）
米国	車両燃費（'07年11.0 ⇒ '15年15.2Km/L）

タイヤ関連への提言

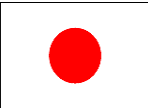


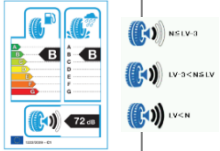




IEA（国際エネルギー機関）（08年7月洞爺湖サミットにて提言）

タイヤで自動車燃費を5%削減

- ・ 3% : タイヤの転がり抵抗（タイヤ単体では20～30%の抵抗減少）
- ・ 2% : 空気圧管理（空気圧監視システムによる空気圧維持管理）

タイヤを取り巻く社会動向

世界中で補修用(一般市販)タイヤの性能指標化が実施されている

国・地域	対象				2010年	2011年	2012年	2013年
	転がり抵抗	ウェットグリップ	ライフ	ノイズ				
	乗用車 (補修用夏タイヤ)	乗用車 (補修用夏タイヤ)	/	/	自主規制  (新車・トラックへの拡大等は未定)			
	乗用車 トラック	乗用車 トラック	/	乗用車 トラック			法規制 生産—2012年7月 販売—2012年11月	
	乗用車 (補修用)	乗用車 (補修用)	乗用車 (補修用)	/			法規制 (未実施)	
	乗用車 トラック	乗用車	/	/			法規制(生産) 乗用車—2012年11月 トラック—2014年11月	

燃費

安全

省資源

今後のタイヤ開発における3つの方向性



低燃費性



安全性
(グリップ)



省資源
(ゴム強度)

高度化するタイヤ開発ニーズに素早く対応するため
コンピュータシミュレーションを活用

タイヤ構造

(タイヤを構成する主な部材)





DRS I

コーナリング
NVH 摩耗

タイヤ転動特性

DRS II

ハイドロ 雪 サンド
マッド 車両

路面環境・車両

DRS III

空洞共鳴 パターンノイズ
空気騒音

DRS : Digital Rolling Simulation

1992年 シミュレーション専門部門立ち上げ

1993年 初代スパコン導入

タイヤシミュレーション

実際に見ることが困難な現象をシミュレーションで解析して観る

DRS (Digital Rolling Simulation)

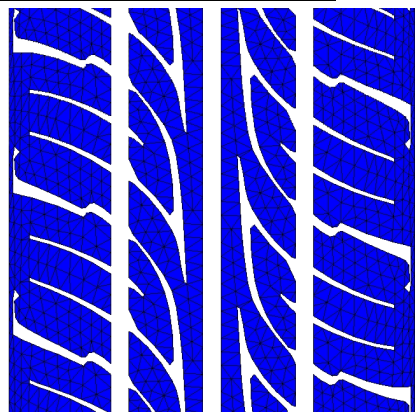
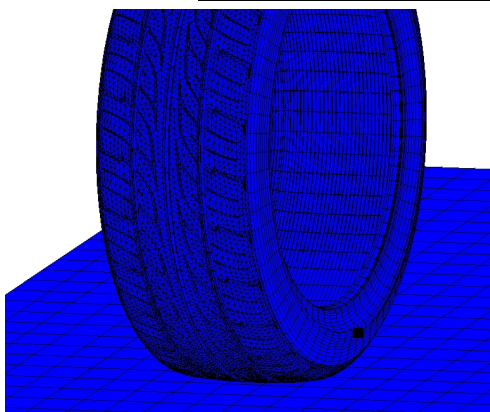
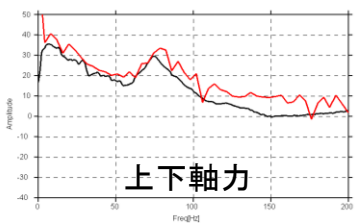
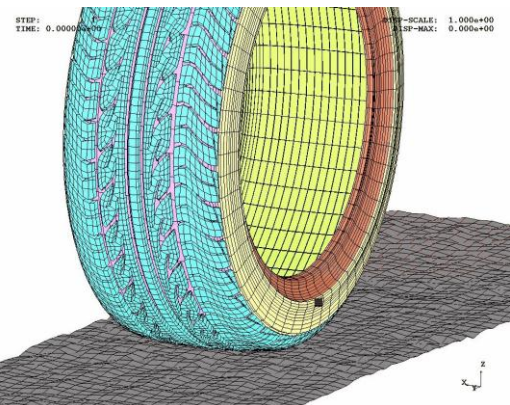


乗り心地
ノイズ

操縦安定性

車軸に発生する力(振動)

ハンドルを切った時のタイヤの挙動



転動中に車軸に
発生する力

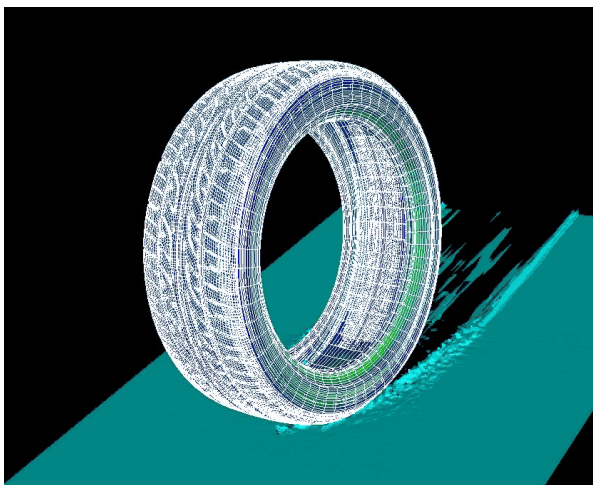
転動中にタイヤに
発生する力

転動中のタイヤ
接地面の可視化

シミュレーションで解析してタイヤの性能発現メカニズムを知る

DRS II : 路面環境とタイヤの相互作用

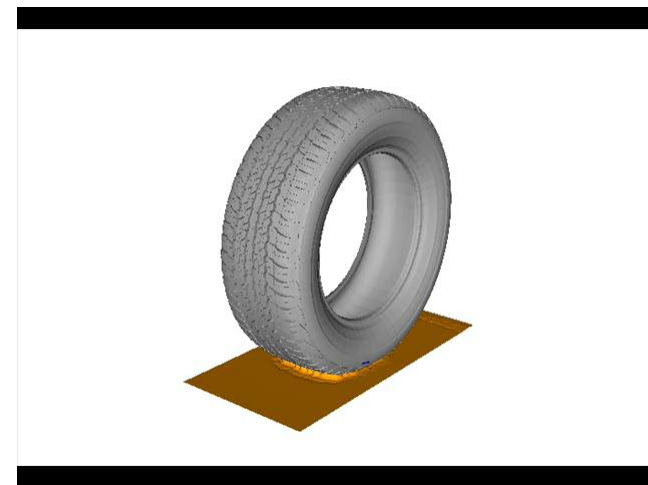
タイヤトレッド模様シミュレーション



ハイドロプレーニング現象



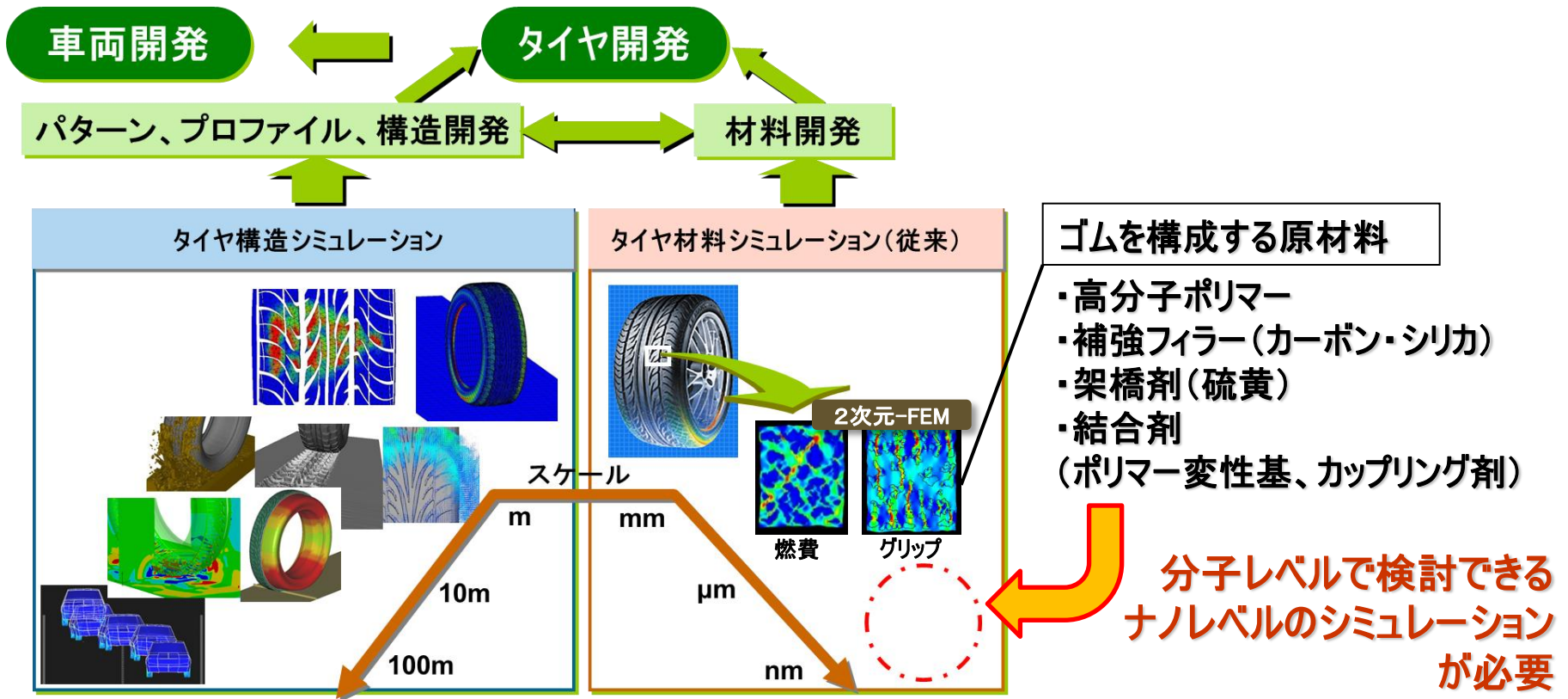
雪上走行



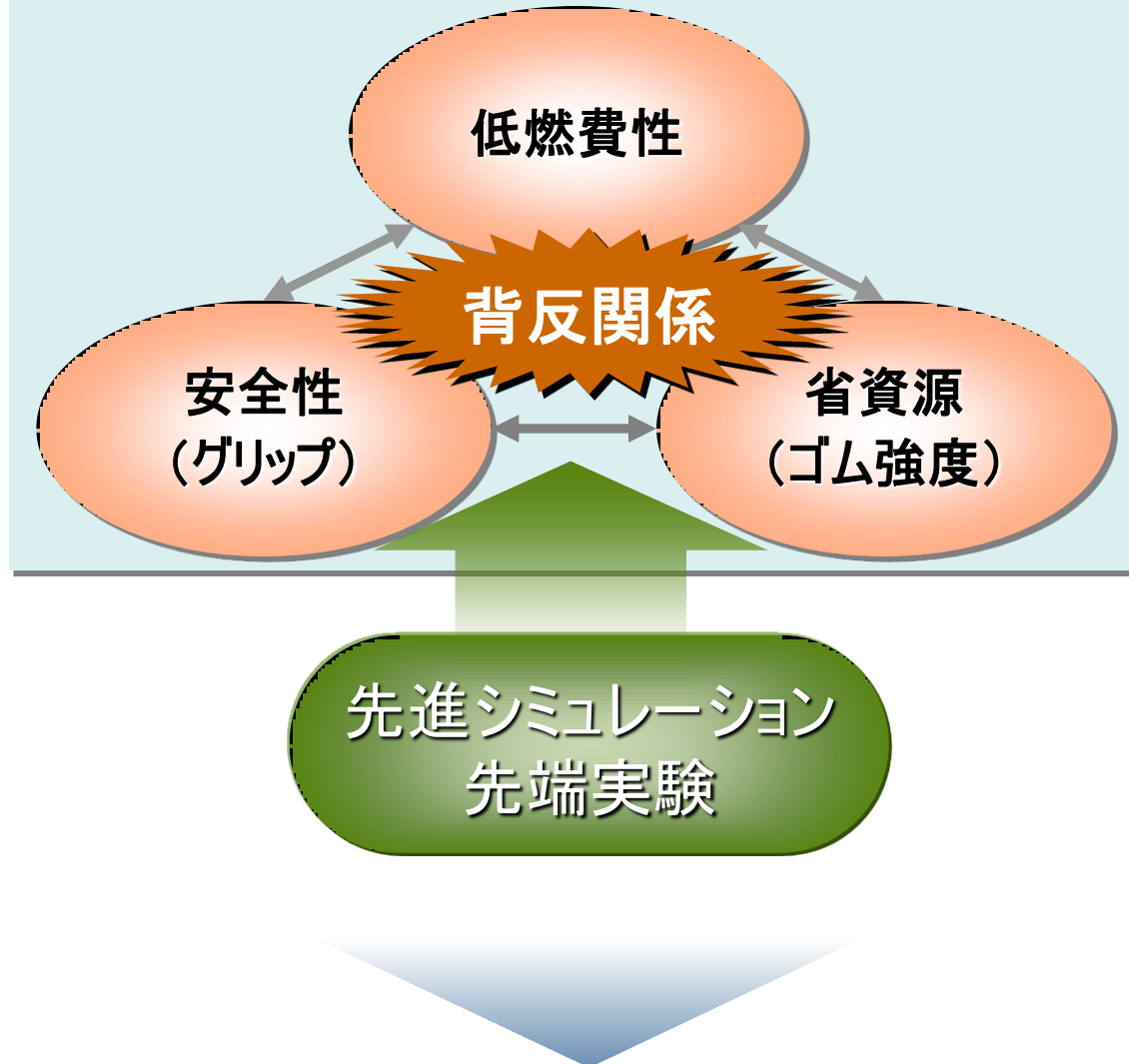
泥濘地走行

更なる低燃費性・高グリップ性・省資源を実現させるために

低燃費・高グリップ・省資源に対応できる高機能ゴム材料開発が必要
→ゴム内部のナノの領域を可視化する材料シミュレーションの開発



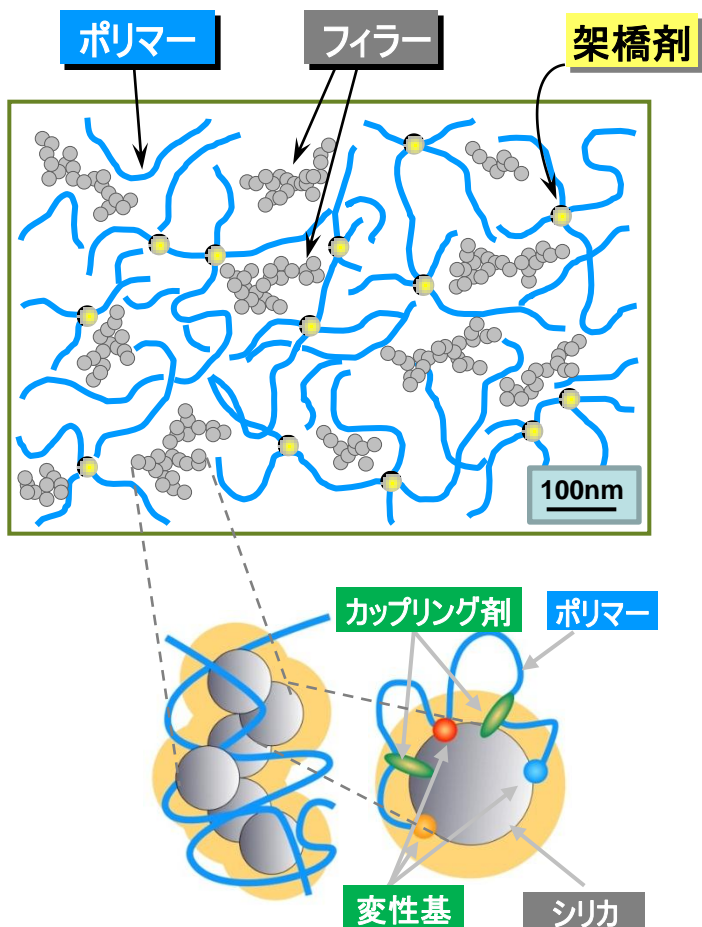
更なる低燃費性・高グリップ性・省資源を実現させるために



三律背反するタイヤ性能を全て向上させる

タイヤ用ゴム材料

ゴム中のイメージ図



原材料

ポリマー

 ゴムの骨格材料

天然ゴム、合成ゴム ⇒ **柔らかく良く伸びる**

フィラー

 ゴムの補強材料

カーボン、シリカ

⇒ ①強く→**摩耗性能を上げる**

②エネルギーロスを生じる →**燃費やグリップに影響する**

架橋剤

 ゴムとしての強度を発現させる添加剤

硫黄

結合剤

 原材料の性能を引き出す添加剤

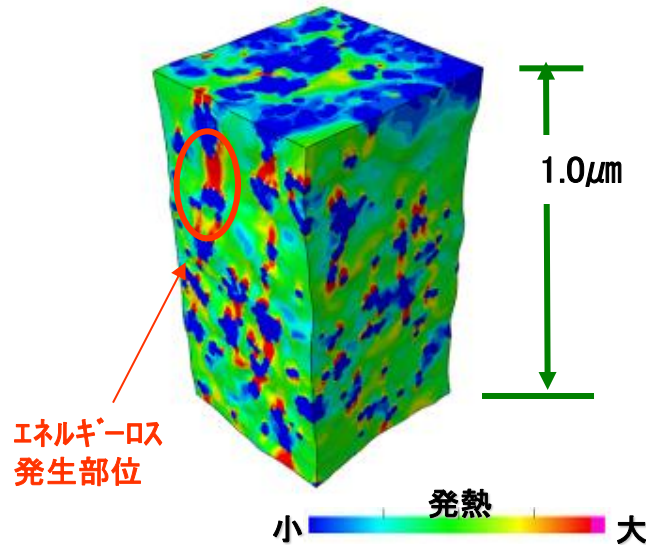
ポリマー変性基、カップリング剤

ナノレベルで非常に複雑な構造を形成し、機能を発現している

先端実験による可視化とシミュレーションの融合

転がり抵抗を低減するためのゴム内部の発熱予測

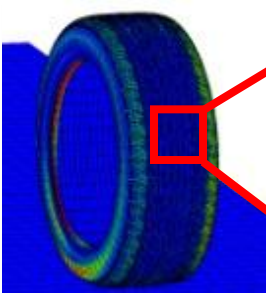
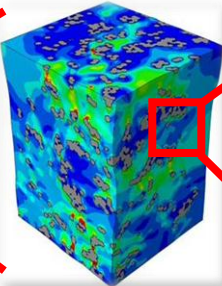
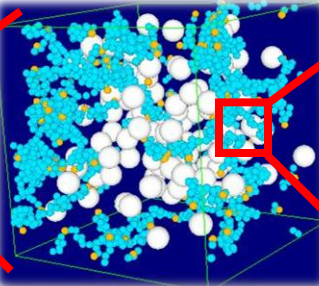
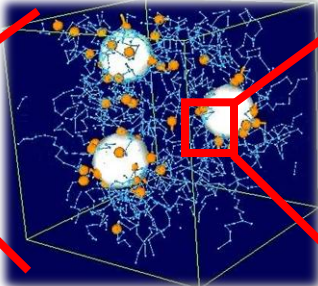
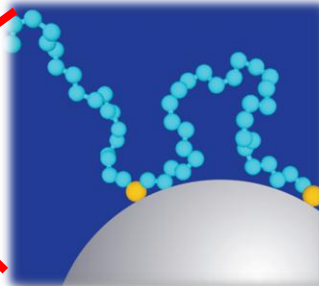
従来できなかった
大規模材料3D-FEMの実現



発熱(エネルギーロス)箇所の特定

“シリカ同士の擦れ”と“ポリマーの無駄な動き”による発熱の抑制がキーポイント

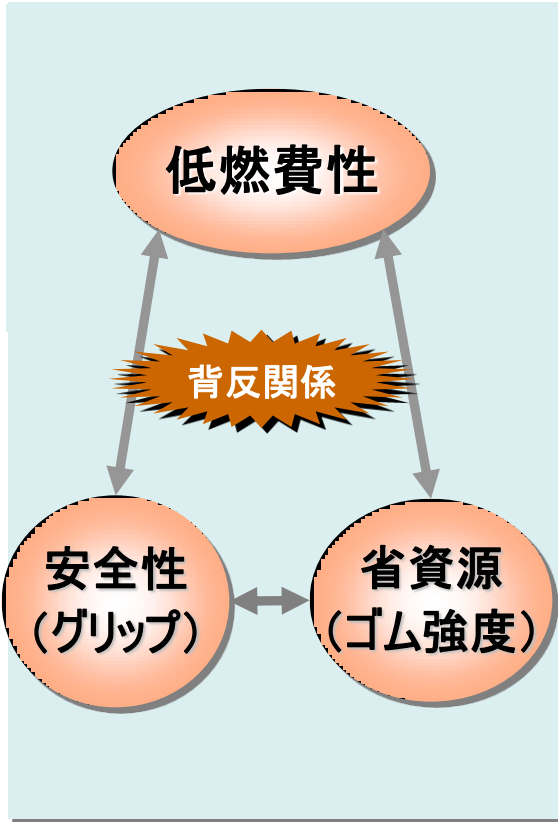
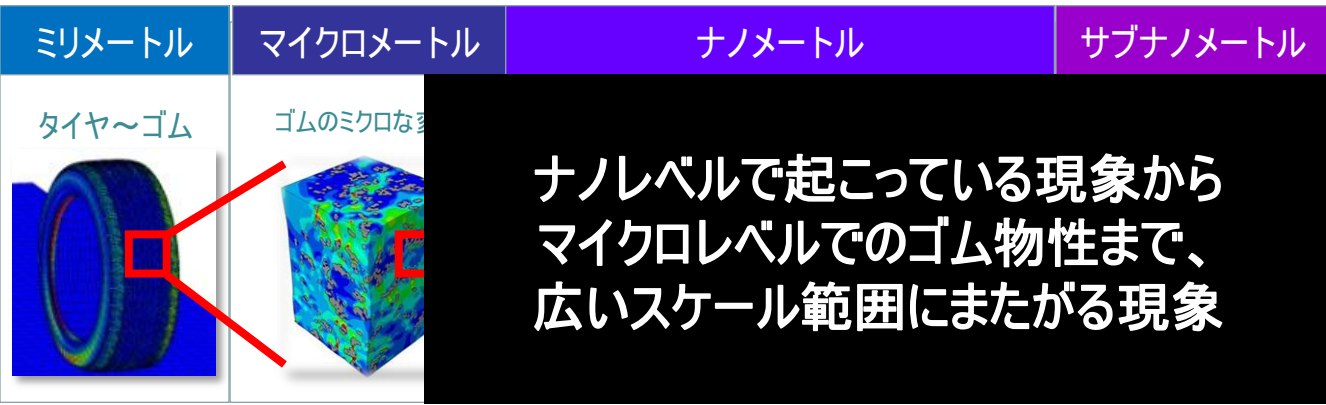
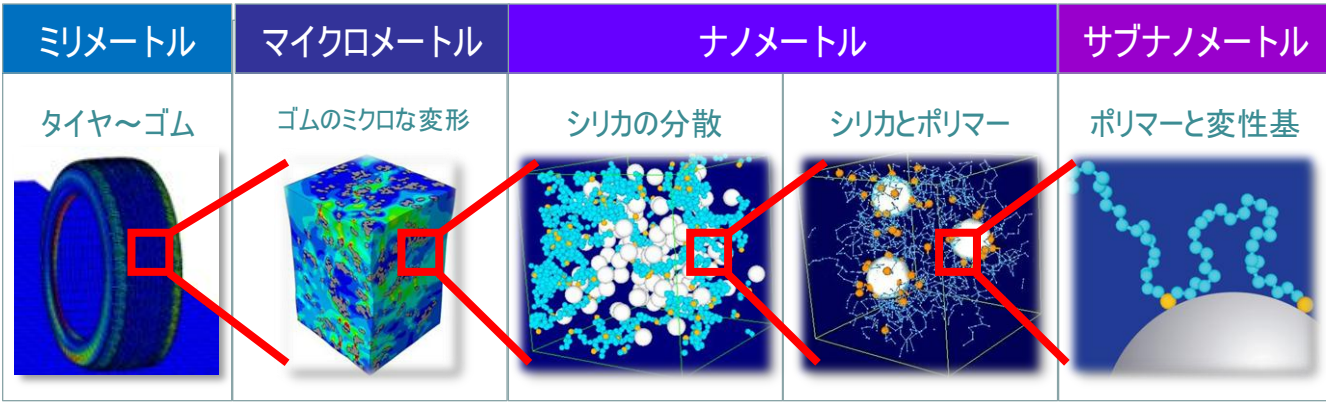
素材の詳細な情報が扱える分子動力学(MD)法を利用する

空間スケール	ミリメートル	マイクロメートル	ナノメートル		サブナノメートル
シミュレーション	タイヤ~ゴム 	ゴムのミクロな変形 	シリカの分散 	シリカとポリマー 	ポリマーと変性基 

低燃費タイヤ用の素材開発
新ポリマー
新結合剤

分子動力学シミュレーション活用における課題

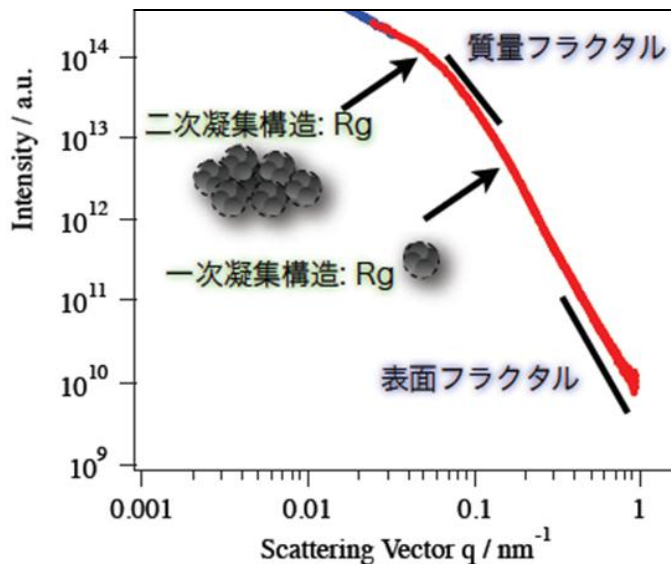
大規模分子シミュレーションの必要性



→ 広いスケール範囲をシミュレーションで直接観ることが必要

京を用いた分子動力学シミュレーション(スケールサイズ)

SPring-8で得られたフィラーの不均質構造・偏りの大きさ



岸本ら, SPring-8シンポジウム2012, 2012年8月.

SPring-8での測定から大きなモデルサイズが必要なことが分かった

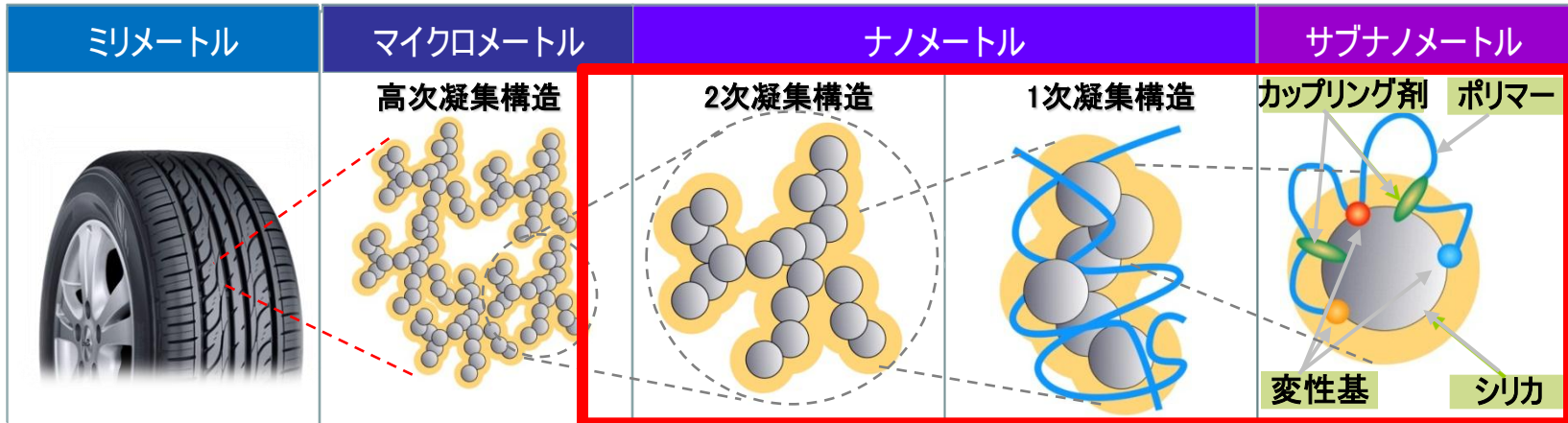
➡ フィラーの不均質な構造・偏りの影響を検討するためには、 $350 \times 350 \times 350 \text{nm}^3$ のモデルサイズが必要

↓

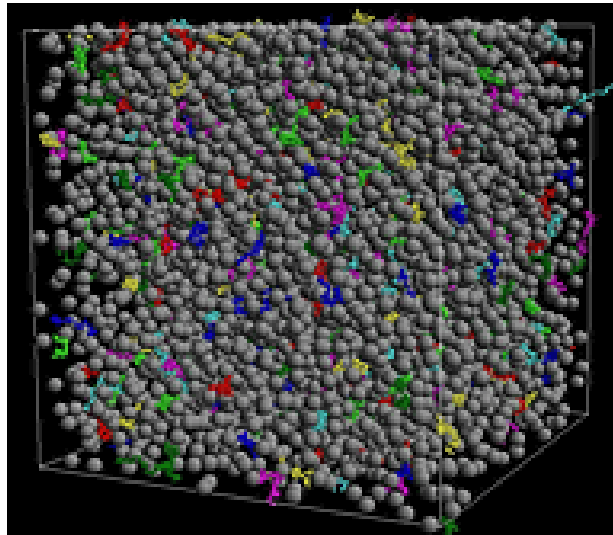
社内の計算モデルサイズの数百倍～数千倍となり、
シミュレーション実行には京が必要(社内では実施不可)

京を用いた分子動力学シミュレーション

グリップ、ゴム強度の向上のために



この領域全てを分子レベルで丸ごとシミュレーション



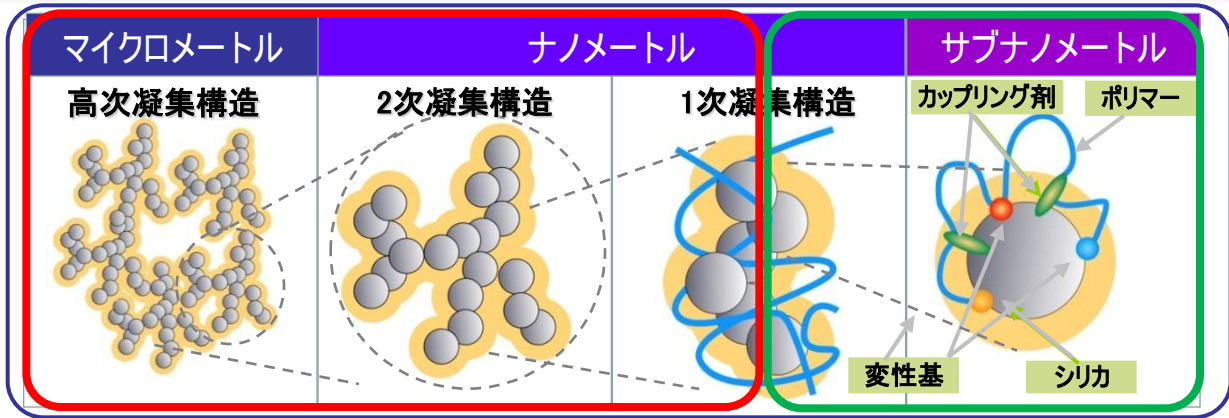
フィラー周辺の分子の動き・相互作用を
実際のゴム中の構造の不均質性・偏りまで
考慮してシミュレーション



サブナノ～サブマイクロにまたがる性能発現
メカニズムを解明し、新素材提案につなげる

図：大規模シミュレーション用モデル例

シミュレーションの精度向上に向けて



構造解析
+
(ダイナミクス)



ダイナミクス

融合



予測
・新材料設計
・機能/物性

新素材創出 (2016年以降 商品に採用)

発表など:

Sakamaki *et al.*, The 3rd AICS International Symposium, 2013 Feb.

坂牧ら, 高分子計算機科学研究会, 2013年3月.

住友ゴム工業, ニュースリリース, 2012年9月6日. 2013年3月14日

謝辞:

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 雨宮慶幸教授、篠原佑也助教

防衛大学校 応用物理学科 荒井隆教授

京都大学化学研究所 増淵雄一准教授

株式会社JSOL

富士通株式会社

ご清聴ありがとうございました



for you, for the earth

あなたのために、地球のために。