

環境負荷低減高性能タイヤの開発 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

研究・開発機関：住友ゴム工業（株）
利用施設：（独）海洋研究開発機構 地球シミュレータ
計算規模：最大 512 ノード (32Tflops) 利用
利用ソフトウェア：粗視化MDシミュレーション*

Before

- 自動車低燃費化を図るために、タイヤの転がり抵抗を大幅に低減する試みは、ゴム材料にシリカ・ナノ粒子を配合することにより進められてきましたが、実験による材料探索は限界に近づきつつあります。
- これまで、ゴム材料のナノ構造と特性の関係をシミュレーションにより解明することはできませんでした。

After

- スーパーコンピュータを利用することにより、分子動力学法を用いた1億個レベルの粒子の大規模シミュレーションが可能になりました。
- これにより、ナノ粒子のゴムへの配合によるゴム強度の増加、繰り返し変形時のヒステリシスロスの増加のメカニズムが解明できるようになりました。



図1. タイヤ中に分散されたカーボンブラック

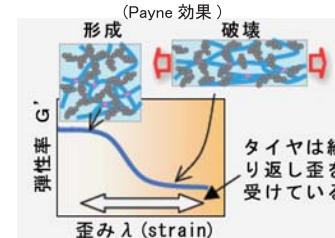


図2. ナノ粒子配合ゴム特有の現象

利用成果

ナノ粒子が数個～10 個入る空間は $200\text{nm} \times 200\text{nm} \times 200\text{nm}$ で、この空間中のゴムを形成するボリソプレンの原子総数は約 8 億個ですが、イソプレン単位で粗視化した場合の粒子数は約 6400 万個になります。1 億個レベルの粒子を対象とした分子動力学法によるシミュレーションプログラム（超並列・分散入出力）を開発し、地球シミュレータを用いてシミュレーションを実施できるようになりました。

さらに、ゴム高分子とナノ粒子が混在する系の大規模な粗視化分子動力学模型を開発し、高輝度放射光（SPRING-8）によるナノ粒子構造の測定データを地球シミュレータで構造解析した結果と併せ、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発現メカニズムが解明できると期待されます。これらにより、フィラーの形状や分散状態を最適設計して、転がり抵抗を大幅に低減させたタイヤを開発することが可能になります。

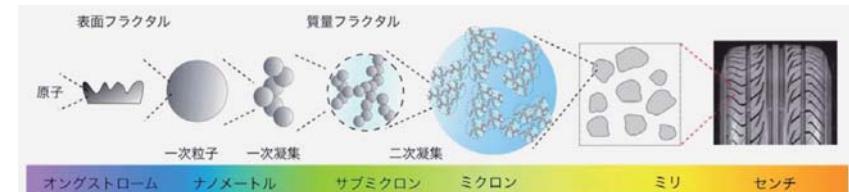


図3. ゴム中の階層的なフィラー凝集構造のモデル図

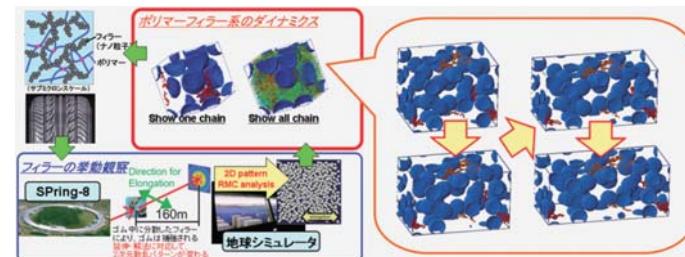


図4. SPring-8 実験とスーパーコンピュータによるシミュレーションのタイヤ開発への活用イメージ

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

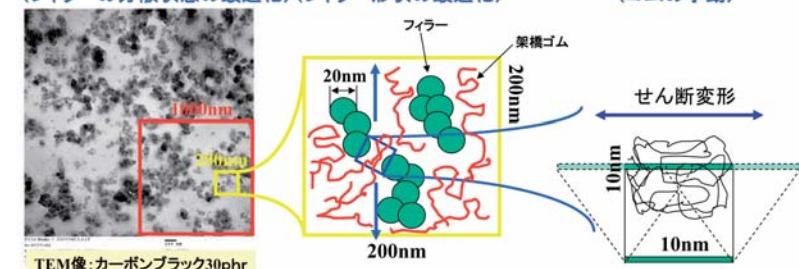


図5. 超大規模粗視化分子動力学シミュレーション