

平成 27 年度 TSUBAME 産業利用トライアルユース 成果報告書

ファイラー充填ゴムの多目的設計探査
Multi-Objective Design Exploration of Filled Rubbers小石 正隆
Masataka Koishi横浜ゴム株式会社
The Yokohama Rubber Co.,Ltd.
<http://www.yrc.co.jp>

材料インフォマティクスによる革新的なゴム材料の開発手法構築を目的とし、タイヤの形状設計で利用している多目的設計探査をゴム材料の微細構造設計へ適用するための課題を解決した。微細構造の分散状態(モルフォロジー)の数値化とそれに基づいたシミュレーションモデル作成の課題に対してはモルフォロジー測度と階層的ランダムモルフォロジカルモデリングで解決した。また、進化計算を前提とした大規模粘弾性シミュレーションの課題を FFT ベースのスキームによって解決し、TSUBAME2.5 を用いて 10 億 7 千万メッシュの粘弾性シミュレーションを 75 分で終了できる成果を得た。さらに、ファイラー充填ゴムの多目的設計探査の実行テストに成功した。

Toward innovative material design of filled rubbers using material informatics, two issues on the use of multi-objective design exploration (MODE) for the morphological design of filled rubbers was solved in this project. Those are morphological modelling of filled rubbers and an effective scheme to compute visco-elastic response of large-scale models. To overcome the first issue multi-scale random morphological model was applied, and for the second issue FFT based scheme was developed to compute the dynamic visco-elastic response of filled rubbers. The framework of MODE for the material design of filled rubbers was established in this project.

Keywords: Multi-objective design exploration, Filled rubber, Morphology, FFT based scheme

背景と目的

省資源や環境対応を背景に、自動車用タイヤの低燃費化が進められている。低燃費タイヤ開発では、タイヤの構造設計だけではなく、ゴム材料の開発が重要となる。低燃費性能に加え、摩耗性能や運動性能など多くの特性を高次元で両立させるため、革新的なゴム材料開発に向けた方法論の構築が望まれている。一方、ゴム以外の材料開発の流れに目を転じてみると、昨今のディープラーニングなどの AI ブームを背景に、材料インフォマティクスによる革新的な材料開発への取組みが国内外で活発化している¹⁾。材料インフォマティクスとは、シミュレーションなどの計算科学と、データマイニングなどのデータ科学を活用した材料開発を指している。

ゴム材料はカーボンブラックやシリカなどのナノ粒子を高分子材料に充填した不均一な微細構造を有しており、ファイラー充填ゴムと呼ばれる(図1)。ファイラーなどの微細構造は、タイヤの低燃費性能を左右する粘性係数

や、運動性能を左右する弾性係数などの力学特性に大きく影響することが知られている。従来は均一分散を指標とし、もっぱら実験的な手法で材料開発を行ってきた。しかしながら、大幅な開発期間の短縮や革新的な微細構造の発見には材料インフォマティクスに基づいた微細構造設計が望まれる。

そこで本プロジェクトでは、材料インフォマティクスによるゴム材料開発手法を構築するために、タイヤの形状設計で利用している多目的設計探査^{2,3)}という、シミュレーションと進化計算とデータマイニングを組合せたインフォマティクス手法をゴム材料の微細構造設計へ適用する際の2つの大きな課題を解決した。2つの課題とは、不均一な微細構造の分散状態(モルフォロジー)の数値化とその数値に基づいたシミュレーションモデル作成、及び進化計算を前提とした大規模粘弾性シミュレーションである。本プロジェクトでは前者の課題を数学的モルフォロジー(Mathematical Morphology)

の分野で提案された手法(モルフォロジー測度と階層的ランダムモルフォロジカルモデリング)⁴⁾で解決した。さらに、後者の課題を FFT ベースのスキーム⁵⁾によって解決し、TSUBAME2.5 を用いて 10 億 7 千万メッシュの粘弾性シミュレーション(微小変形)を 75 分で終了できる成果を得た。さらに、モルフォロジーを規定するパラメータを設計変数とするフィラー充填ゴムの多目的設計探索の実行テストに成功した。

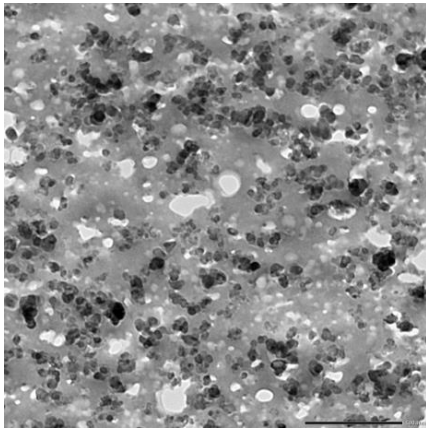


図1:カーボンブラック充填ゴムの TEM 画像

概要

ゴム材料の微細構造設計のための多目的設計探索の手順を図2に示す。多目的設計探索をゴム材料などの微細構造設計へ適用する際には2つの大きな課題が存在する。第一の課題は、フィラーなど不均一構造の分散状態(モルフォロジー)の数値化と、その数値に基づいたシミュレーションモデルの作成である。第二の課題は、必要な空間解像度(例えば 1nm)と領域サイズ(例えば 1,000nm³)に起因するシミュレーションモデルの大規模化(例えば 10 億メッシュ)への対応である。進化計算によるパレート解探索を前提としているため、個体数分の大規模計算を世代数だけ繰り返す必要がある。また、シミュレーションモデルの大規模化は計算時間だけではなく結果の可視化にも影響する。

第一の課題を解決するため、本プロジェクトでは数学的モルフォロジーの分野で提案されているモルフォロジー測度と階層的ランダムモルフォロジカルモデリング(図3)をモルフォロジーの数値化とシミュレーションモデル作成に適用した。モルフォロジー測度としては共分散(Covariance)と累積粒度分布(Cumulative Granulometry)を用いた。共分散は空間分布を表す指標であり、体積分率やフラクタル次元に関する情報

を含んでいる。また、累積粒度分布は凝集塊(アグリゲート)などの粒度分布を表す。モルフォロジー測度を用いることで実材料(例えば図1の TEM 画像)とシミュレーションモデルのモルフォロジーの特徴を同じ指標で評価できるため、材料開発のフェーズにおいて材料インフォマティクスで得られた理想的なモルフォロジーと実サンプルのモルフォロジーとの定量的な比較が可能となる。また、その定量比較から階層的ランダムモルフォロジカルモデリングのパラメータを同定する(シミュレーションモデルを作成する)ことも可能となる。さらに、階層的ランダムモルフォロジカルモデルのパラメータはパラメトリックスタディや、進化計算などによる最適化において設計変数として取り扱うこともできる利点を有している。

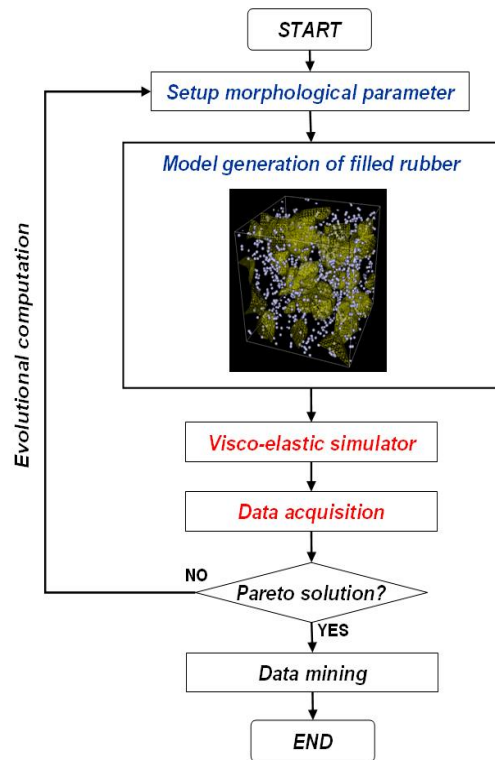


図2:ゴム材料の多目的設計探索の手順

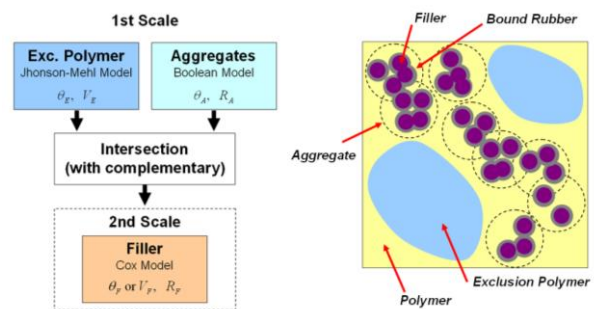


図3:階層的ランダムモルフォロジカルモデル

また、大規模粘弾性シミュレーションの課題に対しては、弱形式をベースにした FEM やメッシュフリー法とは異なる FFT ベースのスキームの適用で解決した。FFT ベースのスキームは図4に示すように、グリーン関数を用いフーリエ空間で釣合い方程式を解く手法である。ただし、適用対象が限定されることと異種材用間の弾性率比が大きいと収束が遅くなる欠点を有している。

- (i) ひずみ場の初期化: $\varepsilon \equiv 0$
- (ii) 応力場の計算: $\sigma = \mathbf{C} : \varepsilon$
- (iii) 局在場の計算: $\tau_{ij}(\mathbf{x}) = \sigma_{ij}(\mathbf{x}) - C_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}(\mathbf{x})$
- (iv) FFTによる局在場のフーリエ変換: $\tau(\mathbf{q})$
- (v) フーリエ空間でのひずみ場の計算: $\varepsilon_{kl}(\mathbf{q}) = -G_{ijkl}^0(\mathbf{q}) \tau_{ij}(\mathbf{q})$
- (vi) FFTによるひずみ場の逆フーリエ変換: $\varepsilon(\mathbf{x})$
- (vii) ひずみ場の残差が判定基準以下の場合には終了、それ以外は (ii)へ

図4: FFT ベースのスキーム

結果および考察

階層的ランダムモルフォロジカルモデリングで作成した 30 ケースのシミュレーションモデルを図5に示す。これらは、 $1,000\text{nm}^3$ の解析領域 (RVE; Representative Volume Element) を 0.977nm の解像度でモデル化した 10 億 7 千万メッシュ ($1,024^3$ メッシュ) の 3 次元モデルの断面を表しており、一次粒子径 (10nm) と体積分率 (15%) を一定としてフィラーのモルフォロジーを変化させた。このように、パラメトリックにモルフォロジーを変更したシミュレーションモデルの作成が可能になった。

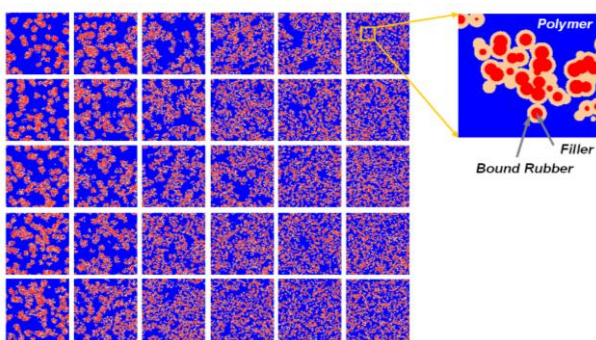


図5: フィラーのモルフォロジーをパラメトリックに変更したシミュレーションモデルの例

次に、FFT ベースのスキームによる大規模粘弾性シミュレーションの結果について示す。立方体中に球状介在物を配したモデルについて、空間解像度を変更することでメッシュ数を変量し、計算時間(図6)と使用メモリー量(図7)を FEM と比較した。FFT ベースのスキーム

については TSUBAME2.5 で実行したが、FEM (Abaqus) についてはライセンスの制約により社内のクラスターシステムで実行した。

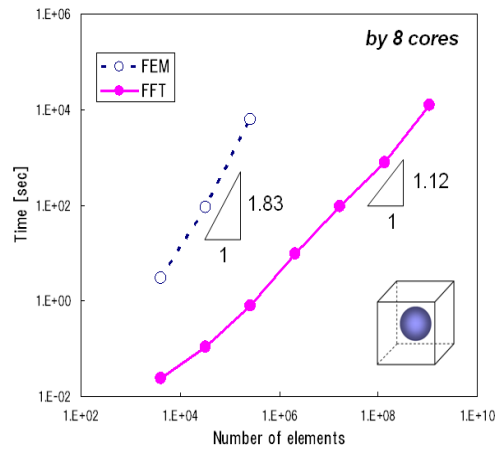


図6: FFT ベースのスキームと FEM との性能比較 (メッシュ数と計算時間の関係)

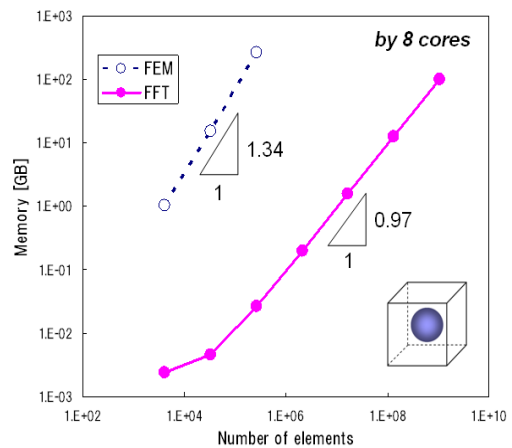


図7: FFT ベースのスキームと FEM との性能比較 (メッシュ数と使用メモリーの関係)

図6より、FFT ベースのスキーム FEM よりも高速であり、メッシュ数の増加にほぼ比例して計算時間が増加していることが分かる。一方、FEM ではメッシュ数のほぼ自乗で計算時間が増大することが確認された。このことから、計算モデルの規模が大きくなるにしたがって FFT ベースのスキームの優位性が更に高まる。使用メモリーについても FFT ベースのスキームの方が格段に優れていることが分かる(図7)。本事例では 32 コア(1ノード)の並列計算により 10 億 7 千万メッシュの計算を 75 分で終了できた。

最後に、図2のフローチャートに沿って微細構造のモルフォロジーを設計変数とする多目的設計探索の実行テストを TSUBAME2.5(S-node) で実施した。フィラー

のモルフォロジーを規定する3つのパラメータを設計変数とし、巨視的な弾性率と損失正接 ($\tan \delta$)、および応力分布(平均値と標準偏差)を目的関数とし、進化計算には NSGA II⁶⁾を利用した。モルフォロジーを規定するパラメータ変更に伴うシミュレーションモデル作成、粘弾性シミュレーション、進化計算の各フェーズにおいて特に問題なくテストを完了した。一方、実行時間について新たな課題もみえた。図8に各世代・個体ごとの計算時間(モデル作成と粘弾性シミュレーションに要する時間)の履歴を示す。世代によっては各個体の計算タイミングにズレが生じ、全個体の計算が終了するまでに実計算時間の2倍程度要していることが分かった。

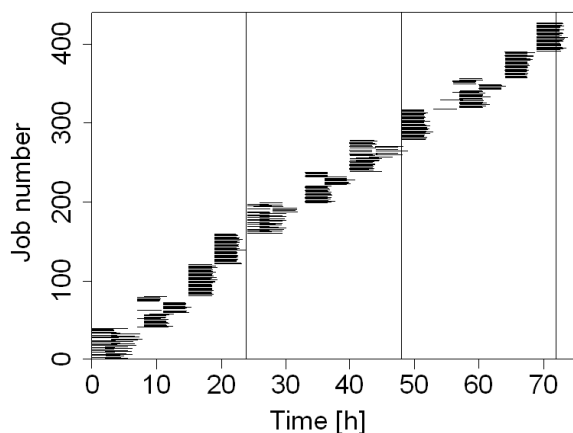


図8: 世代・個体ごとの計算時間の履歴(初期の10世代)

まとめ、今後の課題

材料インフォーマティクスによるゴム材料開発手法の構築を目的とし、本プロジェクトでは多目的設計探索をゴム材料の微細構造設計へ適用するための課題を解決した。微細構造の分散状態(モルフォロジー)の数値化とその数値に基づいたシミュレーションモデル作成の課題に対してモルフォロジー測度と階層的ランダムモルフォロジカルモデリングで解決した。また、進化計算を前提とした大規模粘弾性シミュレーションの高速化という課題をFFTベースのスキームによって解決し、TSUBAME2.5を用いて10億7千万メッシュの粘弾性シミュレーションを75分で終了できる成果を得た。さらに、モルフォロジーを規定するパラメータを設計変数としたフィラー充填ゴムの多目的設計探索の実行テストに成功した。今後は革新的な材料開発を目指し本プロジェクトで構築した方法論を適用していく予定である。

一方、解決すべき課題も存在する。まず、マルチス

ケールを視野に入れたシミュレーションの高度化である。ゴム材料では大変形時のフィラーの相対配置が変化するため、変形の小さなFRPや金属系の不均質材料に比べモルフォロジーが力学特性に与える影響が大きい。そのため、本プロジェクトでは、FEMに比べて局所的大変形に対しロバストなメッシュフリー法のソルバー改良(高速化)を商用ソフトの開発元の協力を得て進めてきたが目標を達成できなかった。ただし、抜本的な改善にむけ具体的な道筋をつけることができたことは大きな前進である。また、高分子鎖のダイナミクスやフィラーと高分子鎖との相互作用によって生じる力学特性の考慮も今後の課題である。さらに、革新的な成果を得るには問題設定(設計パラメータの選択とその定義域の設定)が鍵となる。加えて、進化計算の同一世代における全個体の計算タイミングを一致させることも課題の一つである。以上の課題を順次解決し方法論をステップアップしていく予定である。

謝辞

本プロジェクトの技術開発でご協力頂いた Dominique Jeulin 教授(MINES ParisTech/CMM)の研究グループに感謝の意を表します。

参考文献

- 1) 田中功, 世古敦人, 森分博紀, FC Report, 34, No.1, (2016):1-6
- 2) Koishi, M. and Shida, Z, Tire Science and Technology, 34, (2006):170-194.
- 3) Koishi, M., Miyajima, H. and Kowatari, N., *The 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI)*, (2014)
- 4) Figliuzzi, B., Jeulin, D., Faessel, M., Willot, F., Koishi, M. and Kowatari, N., *Technische Mechanik*, 36, 22, (2016)
- 5) Willot, F. and Pellegrini, Y.P., *Continuum Models and Discrete Systems CMD511* D. Jeulin and S. Forest (eds), Ecole des Mines Paris, (2008):443-449
- 6) Deb., K., Agrawal, S., Pratab, A. and Meyarivan, T., KanGAL Report 200001, Indian Institute of Technology, India, (2000)