#### 住友ゴムにおける商品開発での HPC 活用事例

#### 氏名 角田 昌也



略歴

1992 年 神戸大学工学部工業化学科卒業 同年 住友ゴム工業株式会社入社 多くのシミュレーション手法開発を手掛け、 社内スパコンや社外 HPC を活用し、スポーツ用品 タイヤなどの商品開発に貢献。

2020 年 研究開発本部 研究第一部長就任 2025 年 研究開発本部 計算科学研究部長就任

#### 講演の概要

住友ゴム工業では、タイヤのキー性能であるグリップ、燃費、耐摩耗性というトレードオフ関係のブレークスルーを目指し、HPCを材料開発に積極的に活用しています。ゴムの複雑な階層構造に起因する物性発現メカニズムの解明には、量子化学から分子動力学、有限要素法に至るマルチスケールシミュレーションが不可欠です。

本講演では、スーパーコンピュータ「京」を活用した高強度ゴム開発や、「富岳」による粘弾性特性予測シミュレーションと、それに基づくコンセプトタイヤ『アクティブトレッド』開発の事例を紹介します。さらに、HPCによるメカニズム解明と AI による予測を融合させた、次世代デジタルものづくりの展望についても述べ、今後の産業界における HPC 活用のポイントを提案します。

#### 第8回HPCIコンソーシアムシンポジウム

開催テーマ: HPC技術の産業展開 ~産業界の視点から~

2025年10月23日(木) 開催場所: THE GRAND HALL品川

## 住友ゴムにおける商品開発でのHPC活用事例

住友ゴム工業株式会社 研究開発本部 計算科学研究部 部長 角田 昌也

#### **DUNLOP**

**DUNLOP** 

#### FALKEN

FALKEN

## 住友ゴムの会社概要

【沿革】 1909年創業 1913年国産初の自動車用タイヤを生産 1963年~ 住友ゴム工業(株)

#### 【本計】 神戸市中央区脇浜町

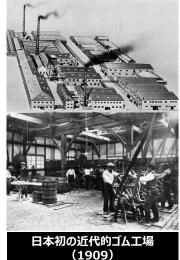


神戸本社















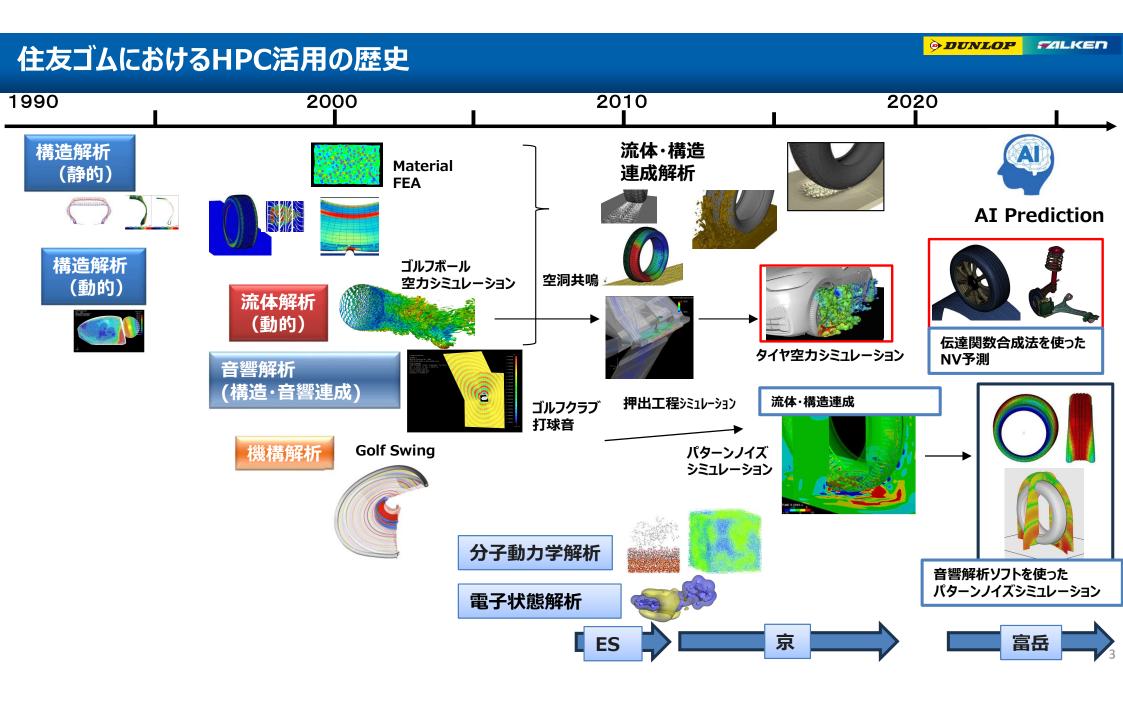
**DUNLOP** 











#### **DUNLOP**

#### FALKEN

#### 住友ゴムにおけるシミュレーション技術の活用紹介

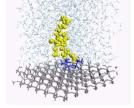
#### **Computer Aided R&D**

#### メカニズム解明→新規アイデア創出

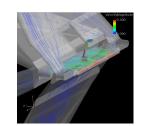
#### **Computer Aided Engineering**

#### 試作削減、評価工数削減

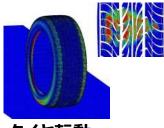




分子シミュレーション



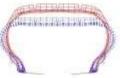
押出シミュレーション



タイヤ転動

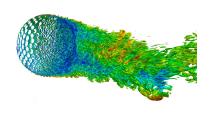


タイヤ耐久予測



インフレート形状

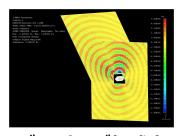
スポーツ用品



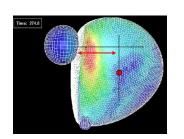
ゴルフボール空力



ゴルフスイング



ゴルフクラブ打球音



ゴルフクラブインパクト

相対予測

高精度化

絶対予測

住友コム工業株式会社

#### シミュレーションの高精度化、高速化で欠かせないHPC

#### 予測精度を上げる

- ●空間解像度を上げる 要素分割数を増やす、分子の解像度を増やす
- ●支配方程式の中で考慮する項を増やす

例:温度変化を考慮する

●近似精度を上げる

例:一次近似から高次近似に変更

- ●収束計算で許容誤差を小さくする(陰解法)
- ●時間刻み幅を小さくする(陽解法)
- ●物性の非線形性を考慮する

例:温度依存性を考慮する

●境界条件の非線形性を考慮する

例:自己接触を考慮する

実際に起こっている現象をより忠実に シミュレーションする



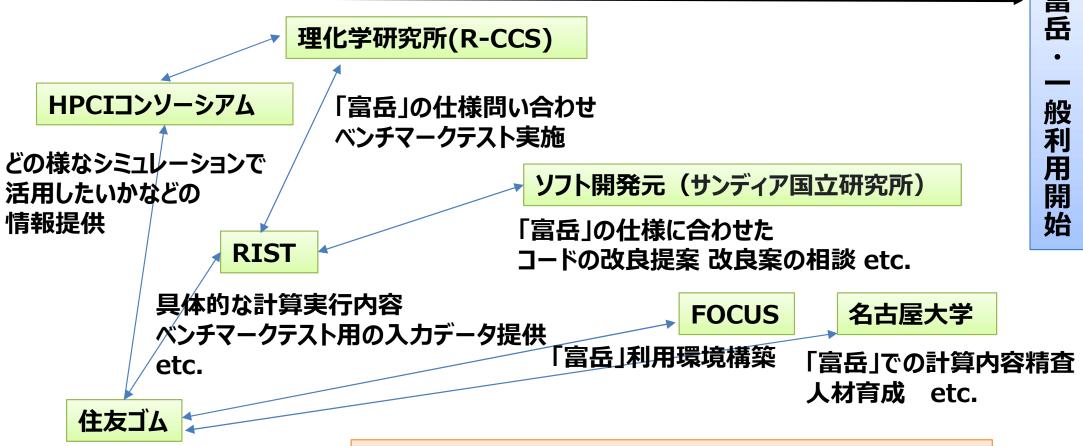
- ●ソフト改良(並列性能を高める など)
- ●ハード更新、増強 **クラウドを活用**する



最先端の計算資源を利用できる機会があること

## 計算科学振興財団(FOCUS)や高度情報科学技術研究機構(RIST)の活用

#### 人材育成・環境構築から実際に使用するまで(富岳活用に至ったケースを元に)

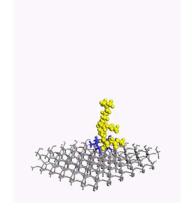


富岳一般利用開始前の2年間で、利用準備ができた

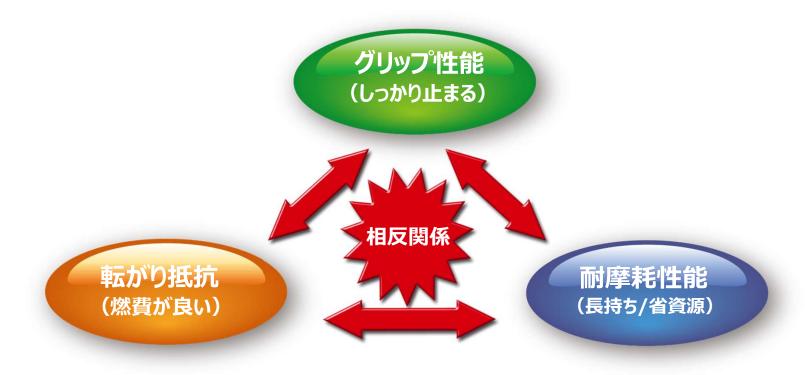
住友コム工業株式会社

# 材料設計におけるシミュレーション技術の活用事例





#### 材料開発におけるシミュレーション技術の紹介



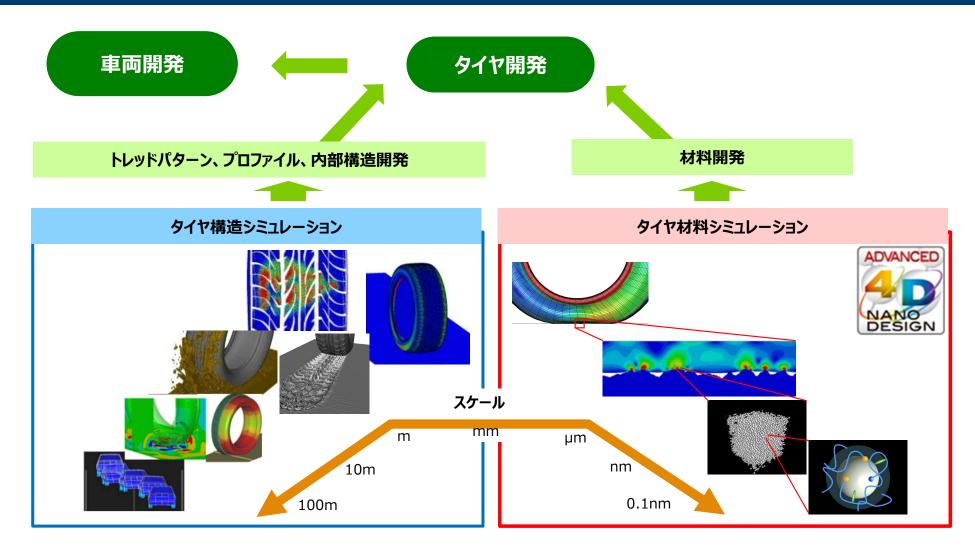
## 高度化するタイヤ開発=3つの性能をそれぞれ向上

コンピューターシミュレーションを活用

## シミュレーションを利用したタイヤ開発

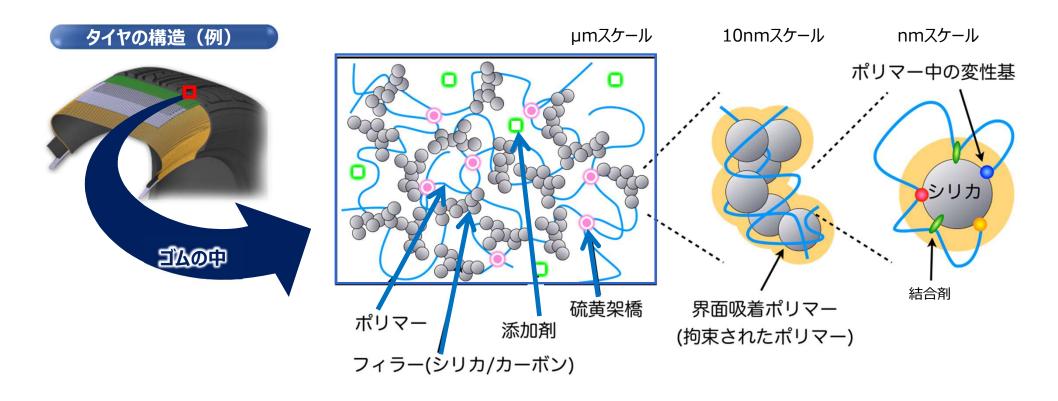






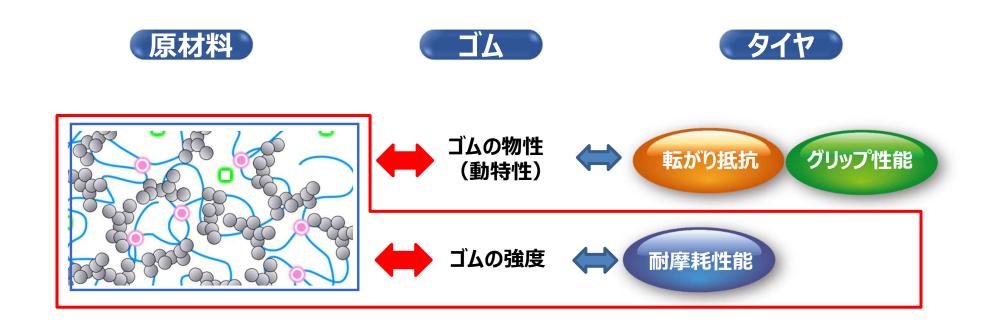






## 原材料が複雑に相互作用しゴムの特性を発現

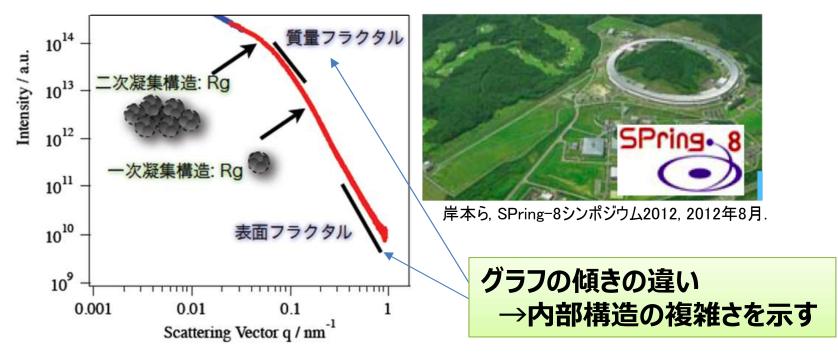
## タイヤ用ゴム・「京」活用の事例紹介



ゴムの『材料』と『ゴムの物性・強度』の関係をより詳しく理解することが重要

#### 大規模分子シミュレーションの必要性

#### SPring-8で得られたフィラーの不均質構造・偏りの大きさ



SPring-8での測定から大きなモデルサイズ(サブ  $\mu$  m)が必要なことが分かった

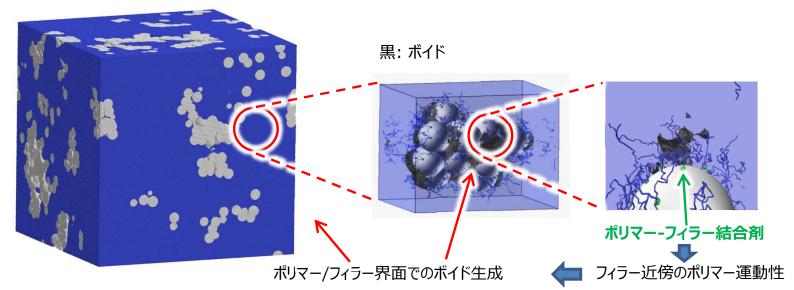
ゴムの粘弾性発現機構はフィラーの分散状態の影響大

高解像度かつ広視野の大規模シミュレーションが必要

## 京スーパーコンピュータを活用した高強度ゴム材料の開発

#### 高強度、高い耐摩耗性能を有するゴム材料の開発

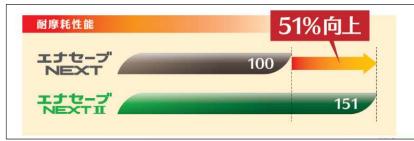


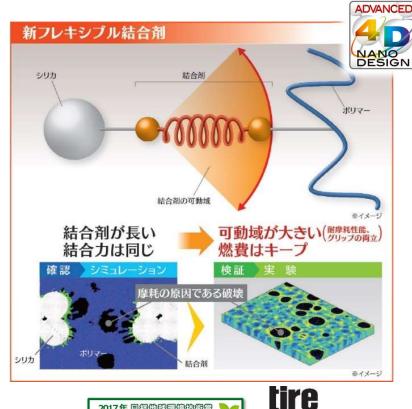


## 解析・シミュレーションに基づく高強度ゴムの開発

#### 2016年上市





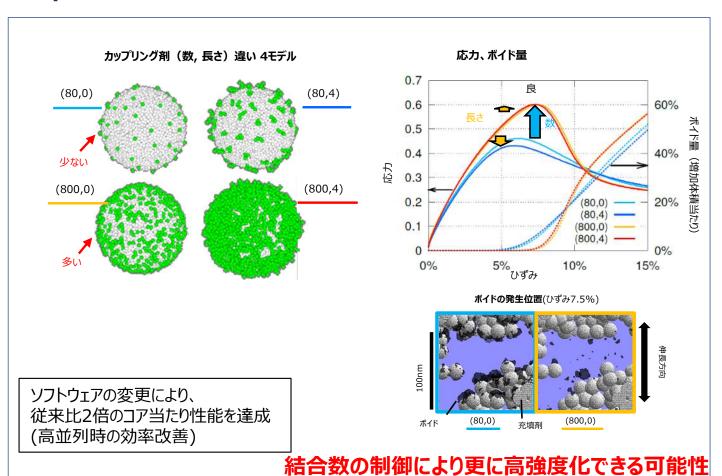






#### 2020年 HPCI利用研究課題優秀成果賞

#### 充填剤/高分子間の構造がゴム強度に及ぼす影響評価



#### 製造工程(混練り工程) の重要性を再認識

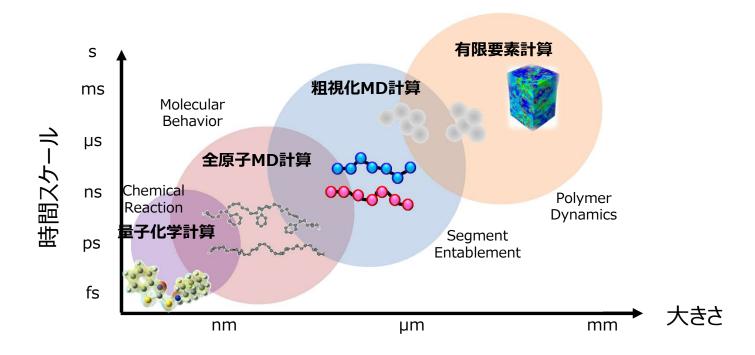


FOCUS様 2021年4月発行 スパコン シミュレーション利用事例集にも掲載

# 原材料 ゴムの物性 転がり抵抗 グリップ性能 ゴムの強度 耐摩耗性能

ゴムの『材料』と『ゴムの物性・動特性』の関係をより詳しく理解することが重要

#### マルチスケールシミュレーションの必要性



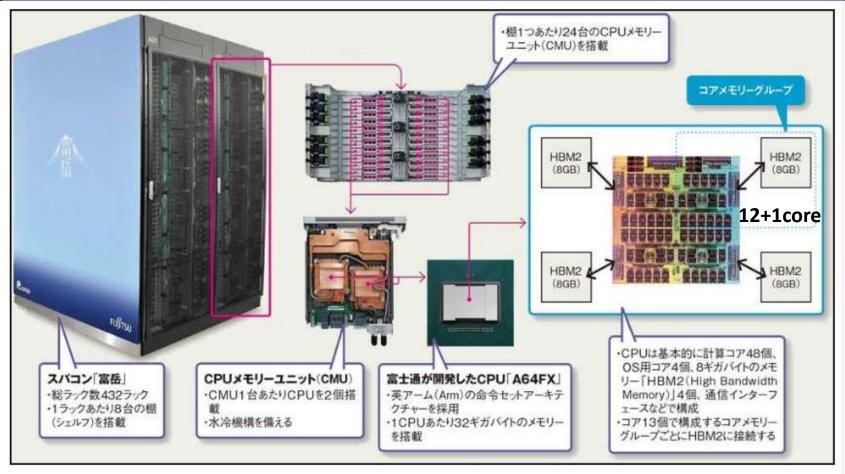
物性(粘弾性特性)を予測するには、大規模かつ長時間の非定常シミュレーションが必要





「京」の20~30倍の速度で 粗視化MD計算が可能

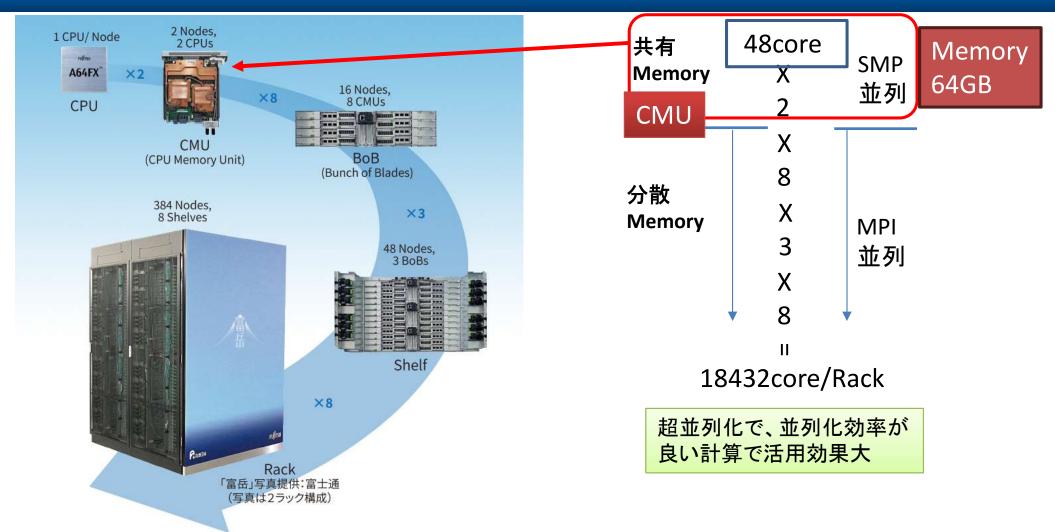
#### スーパーコンピューター富岳の特徴



https://hacarus.com/ja/ai-lab/20210331-fugaku/

CPU: 48core/CPU Memory: 32GB/CPU

## スーパーコンピューター富岳の特徴

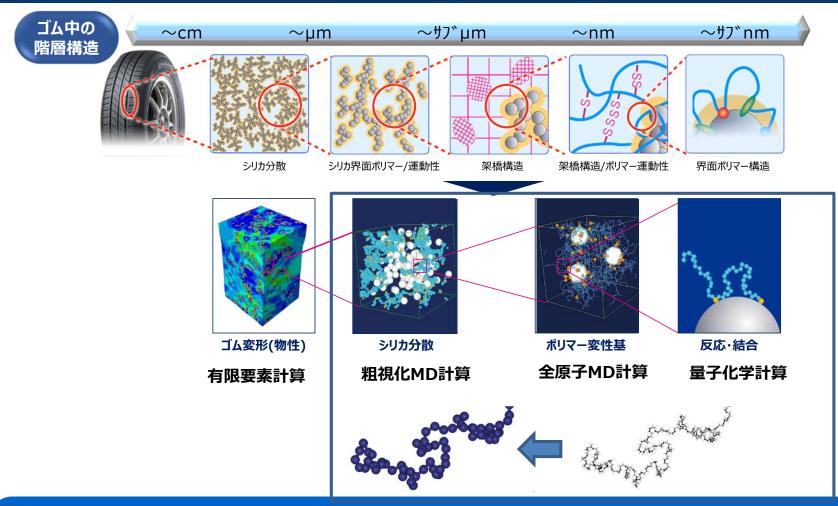


https://www.r-ccs.riken.jp/fugaku/system/

#### *DUNLOP*

#### FALKEN

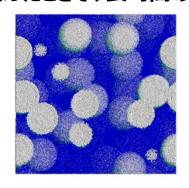
#### 粗視化MDシミュレーションで予測するゴムの粘弾性特性

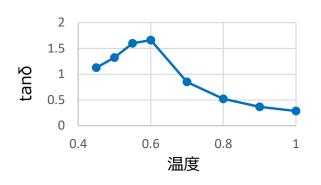


## 粗視化MDモデルの構築には高精度シミュレーションで得られる情報必要

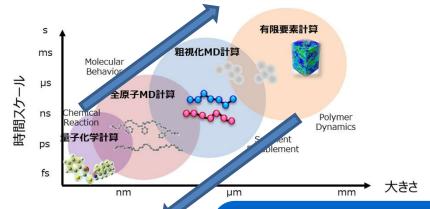
#### 粘弾性特性予測シミュレーション

#### 計算速度が速くなったことで、長時間の現象をシミュレートできるようになった





分子レベルでの変化が物性に どの様に影響するかが分かる



所望の物性を実現できる 分子構造を検討できる

目標の粘弾性特性を満たす分子構造を考案できる

## 粘弾性予測シミュレーションの活用・アクティブトレッドの開発への適用



様々な要求性能 (路面環境変化、使用用途)

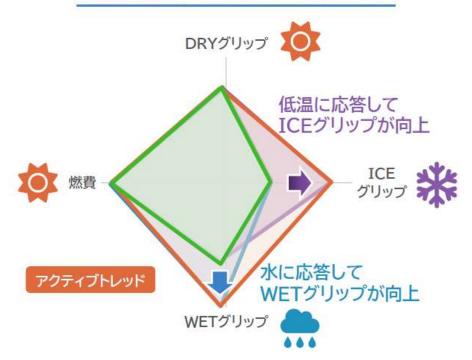
複数のタイヤカテゴリー

#### 性能バランスを変えることにより安全を担保

## アクティブトレッドの開発背景

#### 路面の環境変化を利用して性能をスイッチさせる

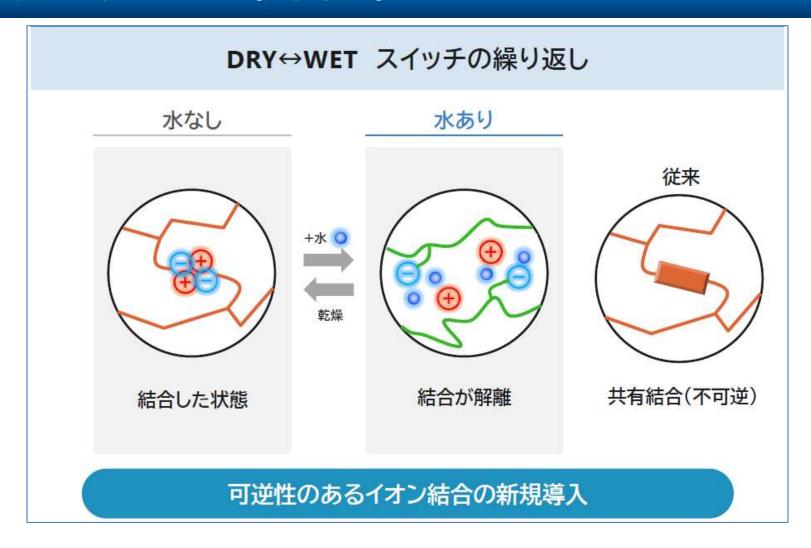
#### アクティブトレッド (イメージ)



路面環境により レーダーチャートが 変化する

## 1つのタイヤに複数の性能を持たせる "新しい発想"

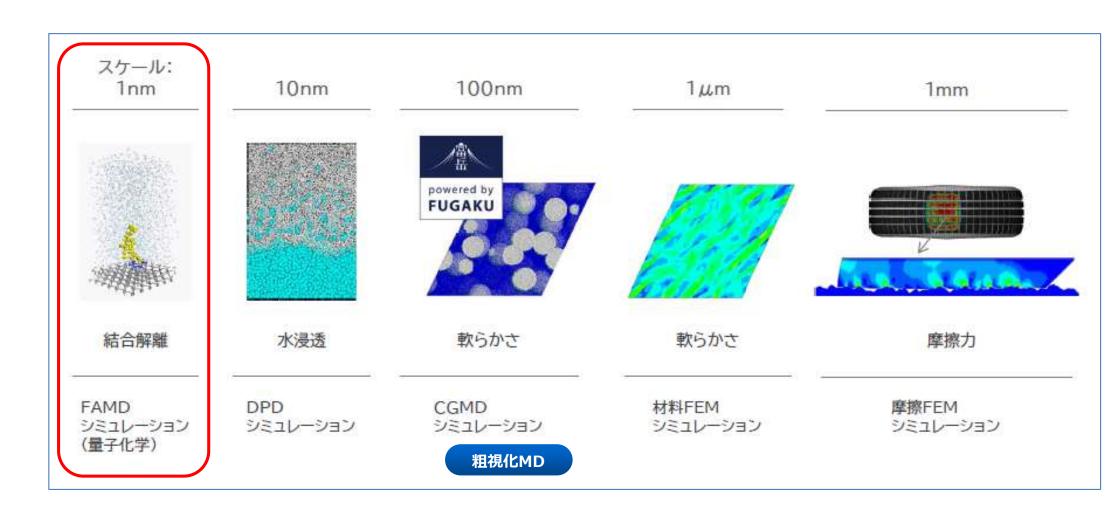




#### **DUNLOP**

#### FALKEN

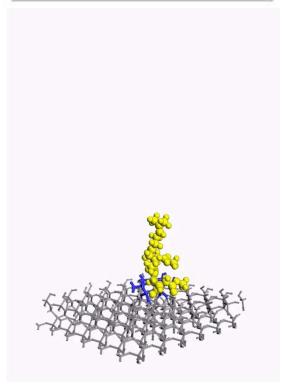
## 粘弾性特性予測シミュレーション(実例紹介)

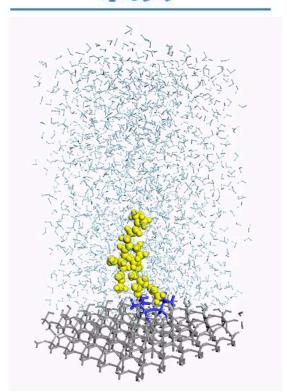


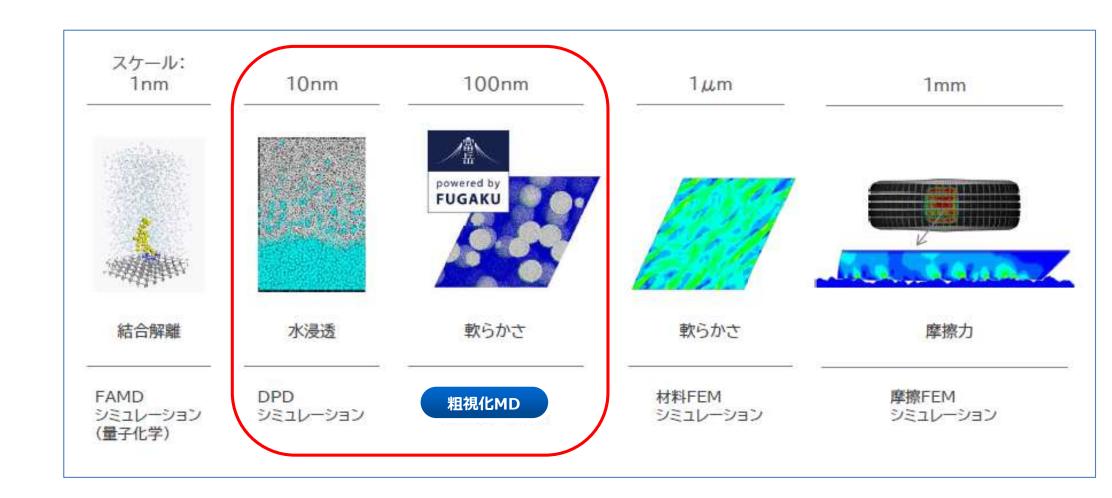


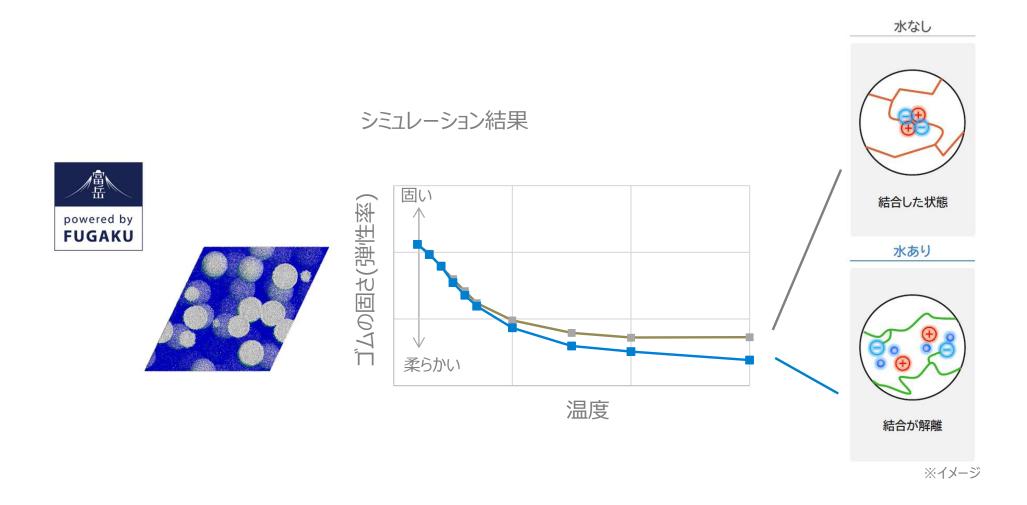
#### フィラー界面 水による結合変化のシミュレーション(全原子MD)

# 水なし 水あり











分子スケールから実スケールを繋ぐ肝

#### 「富岳」による粘弾性特性予測シミュレーションによって開ける世界

#### 実際のタイヤのゴムはもっと複雑

#### 他にも配合物が有る

- ・ポリマーブレンド (2種類以上のポリマー)
- •架橋剤
- ・レジン
- ・オイル
- •老化防止剂
- ・フィラー (シリカ+カーボン)
- ·etc.

#### 工程によって物性が変化する

- ・混練り条件、ミキサーの種類など フィラー分散、カップリング剤の反応率 ポリマーブレンドの状態など
- ・加硫条件 加硫反応の経路、架橋密度 架橋の分布など

#### よりリアルなモデルに



より具体的な配合最適化



より具体的な工程最適化

「高い機能・安全性能」の実現と性能維持、「環境負荷低減」を両立した材料設計

#### **DUNLOP**



#### 材料開発におけるシミュレーション技術活用メリット

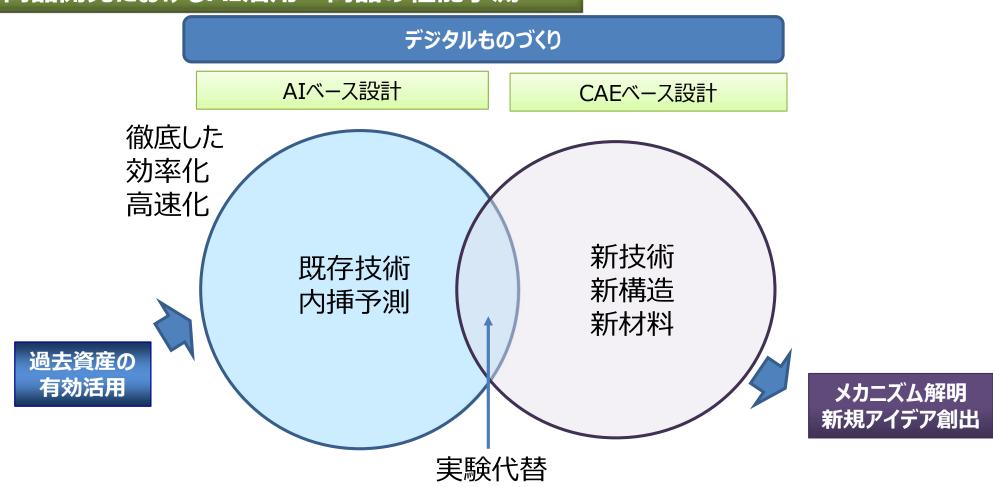
- ①仮説の検証ができる 実験結果から立てた仮説の確からしさを評価できる ⇒メカニズム解明(何故良くなるのかの裏付けが取れる)
- ②仮説通りにならない場合、その原因を特定しやすい 他の仮説を立てることに繋がる ⇒次回どんな実験をするべきかの検討に繋がる
- ③苦労して有機合成しなくても、いろいろとシミュレーションで検討できる

# AI登場によるデジタルものづくりの今後

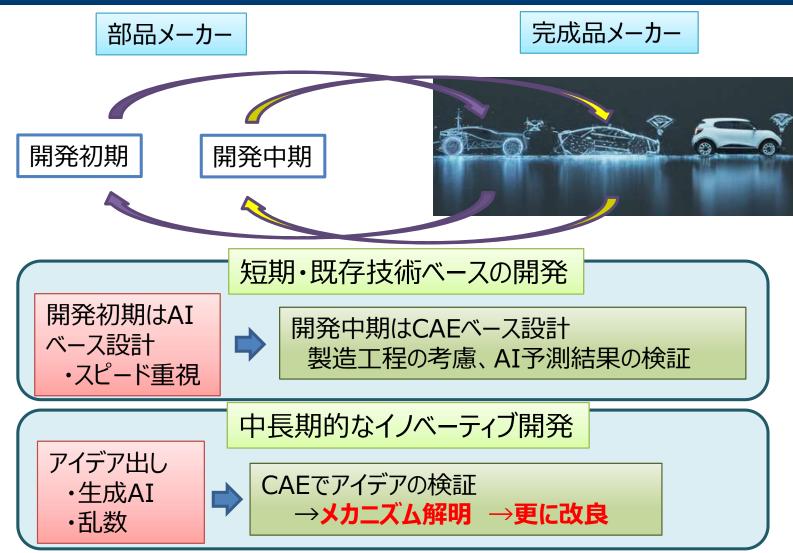


#### AIとCAEの共存・融合

## 商品開発におけるAI活用→商品の性能予測



#### AIとCAEの共存・融合



#### AIの出現によるデジタルものづくりの今後

①AIとCAEとを融合させることで商品開発の効率化を加速 開発初期の性能見積もりが短時間、高精度でできる

開発中期、試作前の性能、費用見積もり精度が向上 →試作やり直し、設計変更の確率が減る

- ②AIでやる部分と人がやる部分の役割分担が明確になる →イノベーティブな開発にリソースが回せる
- ③結果的により少ない工数、期間で、競争力のある 商品開発ができるようになる



#### フラッグシップ・スーパーコンピュータへの期待

## 高速化したい シミュレーションの種類は様々

- ・分子シミュレーション(粗視化MD,電子状態計算DFTなど)
- ・構造解析(陰解法、陽解法など)
- ・流体解析(定常、非定常など)
- ・機械学習など

分野	代表的な計算手法	主要なボトルネック	最適なハードウェア特性
流体シミュレーション (CFD)	陽解法、有限体積法	密結合な <mark>通信</mark> 性能	高いネットワーク帯域と低い遅延、高い並列演算性能。
	(FVM)	(特にメッシュが細かい場合)	GPUによる並列化が有効。
構造解析 (陽解法)	有限要素法 (FEM)	大規模な並列演算。	高い演算性能(GPUが非常に有効)。
構造解析 (陰解法)	連立一次方程式の求	メモリ帯域と通信性能 (疎行列演算)	高速なメモリ帯域、低遅延なネットワーク。
	解 (行列演算)		
分子シミュレーション	分子間力の計算	演算性能(特にGPUの浮動小数点演算)。長	高い演算性能(GPU)。データ構造がシンプルで並列
(全原子MD, 粗視化MD)		距離相互作用では <mark>通信</mark> も重要。	化しやすいため、GPU向き。
電子状態計算	DFT	メモリ(データセットが大きい)とメモリ帯域。I/O	大容量で高速なメモリ。
(第一原理計算)	(密度汎関数理論)	性能。	ノードあたりのメモリ容量。
機械学習/AI	行列積	演算性能(特に低精度演算)とメモリ帯域	GPU、超高速メモリ。



GPU,マルチコアCPU,ノードあたり大容量・高速メモリー,低遅延ネットワーク

◆ 住友コム工業株式会社

多種多様な計算手法の特性にFITUた計算資源の提供に期待

材料開発におけるシミュレーションで紹介したものには、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」および「富岳」を利用して得られたものが含まれています。

課題番号: hp120032, hp140049, hp150183, hp160182

hp170063, hp180064, hp190006 hp210040, hp220033, hp230023 ゴムの先へ。はずむ未来へ。



#### 以上