

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2016年1月28日(28.01.2016)



(10) 国際公開番号
WO 2016/013641 A1

- (51) 国際特許分類:
G01N 33/44 (2006.01) **G06F 17/50** (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2015/071042
- (22) 国際出願日: 2015年7月23日(23.07.2015)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2014-151188 2014年7月24日(24.07.2014) JP
- (71) 出願人: 横浜ゴム株式会社 (THE YOKOHAMA RUBBER CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1058685 東京都港区新橋5丁目3番11号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 小島 隆嗣 (KOJIMA, Takashi); 〒2548601 神奈川県平塚市追分2番1号 横浜ゴム株式会社 平塚製造所内 Kanagawa (JP).
- (74) 代理人: 酒井 宏明 (SAKAI, Hiroaki); 〒1000013 東京都千代田区霞が関3丁目8番1号 虎の門三井ビルディング 特許業務法人酒井国際特許事務所 Tokyo (JP).

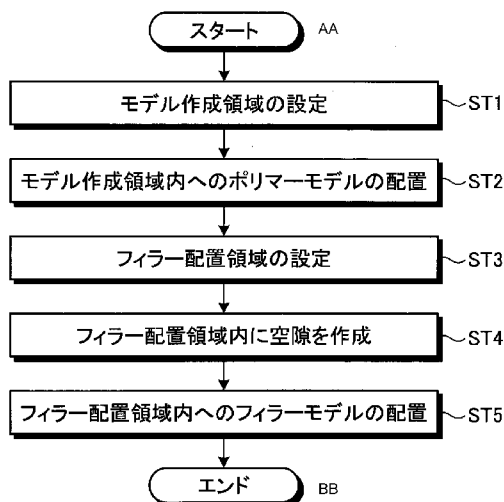
- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) Title: METHOD FOR CREATING ANALYSIS MODEL FOR SPECIFIC SUBSTANCES, COMPUTER PROGRAM FOR CREATING ANALYSIS MODEL FOR SPECIFIC SUBSTANCES, SIMULATION METHOD FOR SPECIFIC SUBSTANCES, AND COMPUTER PROGRAM FOR SIMULATION OF SPECIFIC SUBSTANCES

(54) 発明の名称: 特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラム



ST1 Set model creation area
ST2 Arrange polymer model inside model creation area
ST3 Set filler arrangement area
ST4 Create space inside filler arrangement area
ST5 Arrange filler model inside filler arrangement area
AA Start
BB End

(57) Abstract: To provide a method for creating analysis models for specific substances, a computer program for creating analysis models for specific substances, a simulation method for specific substances, and a computer program for simulation of specific substances, whereby an analysis model for specific substances containing at least two types of substances can be efficiently created and the effect on the material characteristics of specific substances can be accurately analyzed. This method for creating analysis models for specific substances includes: a first step in which a model creation area is set in which an analysis model for specific substances is created; a second step in which a model for a first substance is created inside the model creation area; a third step in which an arrangement area for a second substance is created inside the model creation area; a fourth step in which the model for the first substance, inside the arrangement area for the second substance, is removed from the arrangement area for the second substance and a space for arranging a second substance is created; and a fifth step in which the second substance is arranged in the space and an analysis model for specific substances is created.

(57) 要約:

[続葉有]

WO 2016/013641 A1



2種類以上の物質を含有する特定物質の解析用モデルを効率的に作成でき、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラムを提供すること。本発明の特定物質の解析用モデルの作成方法は、特定物質の解析用モデルを作成するモデル作成領域を設定する第1ステップと、モデル作成領域内に第1物質のモデルを作成する第2ステップと、モデル作成領域内に第2物質の配置領域を設定する第3ステップと、第2物質の配置領域内の第1物質のモデルを当該第2物質の配置領域から排除して第2物質を配置する空隙を作成する第4ステップと、空隙に第2物質を配置して特定物質の解析用モデルを作成する第5ステップとを含む。

明 細 書

発明の名称：

特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラム

技術分野

[0001] 本発明は、特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラムに関し、特に、2種類以上の物質を含有する特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラムに関する。

背景技術

[0002] 従来、自動車用タイヤなどに用いられる変性ポリマーとフィラーとを含む高分子材料のモデルの作成方法が提案されている（例えば、特許文献1参照）。このモデルの作成方法では、変性ポリマーとフィラーとの間の相互作用を他の粒子間の相互作用より大きくして変性ポリマーとフィラーとを高分子材料中に分散させる。そして、変性ポリマーとフィラーとの間の相互作用を他の粒子間の相互作用より小さくして変性ポリマーの末端とフィラーとを反応させて高分子材料の解析用モデルを作成する。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：特開2012-177609号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] ところで、ポリマー及びフィラーを含むゴムなどの2種類以上の物質を含

有する複合材料においては、フィラーの周囲に存在するポリマーの分子運動がコンパウンドの材料特性に大きな影響を与えることが予測される。このような複合材料の材料特性の発現のメカニズムを解明するためには、フィラーとポリマーとが所定領域内に配置された複合材料のモデルを正確に作成してシミュレーションを実行することが有効である。

[0005] しかしながら、従来の高分子材料のモデルの作成方法では、作成するフィラーモデルの形状及びポリマーモデルの作成条件によっては、必ずしも正確な複合材料のモデルを作成することができない場合があった。このため、解析対象となる複合材料などの特定物質の材料特性を十分に解析できるモデルの作成方法が望まれている。

[0006] 本発明は、このような実情に鑑みてなされたものであり、2種類以上の物質を含有する特定物質の解析用モデルを効率的に作成でき、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラムを提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0007] 本発明の特定物質の解析用モデルの作成方法は、コンピュータを用いて分子動力学法により少なくとも2つの物質を含有する特定物質の解析用モデルを作成する特定物質の解析用モデルの作成方法であって、特定物質の解析用モデルを作成するモデル作成領域を設定する第1ステップと、前記モデル作成領域内に第1物質のモデルを作成する第2ステップと、前記モデル作成領域内に第2物質の配置領域を設定する第3ステップと、前記第2物質の配置領域内の前記第1物質のモデルを当該第2物質の配置領域から排除して前記第2物質を配置する空隙を作成する第4ステップと、前記空隙に前記第2物質を配置して前記特定物質の解析用モデルを作成する第5ステップと、を含むことを特徴とする。

[0008] この特定物質の解析用モデルの作成方法によれば、設定したモデル作成領

域内に第1物質のモデルを作成し、作成した第1物質のモデル内に空隙を設けて第2物質のモデルを配置するので、モデル内に配置する第2物質の数が多い場合であっても、2種類以上の物質を含有する特定物質のモデルを効率的に作成することが可能となる。これにより、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる特定物質の解析用モデルの作成方法を実現できる。

[0009] 本発明の特定物質の解析用モデルの作成方法においては、前記第2ステップにおいて、粗視化分子動力学法を用いて前記第2物質を配置する前記空隙を作成することが好ましい。この方法により、計算効率が向上するので、効率的に空隙を作成することが可能となる。

[0010] 本発明の特定物質の解析用モデルの作成方法においては、前記第2ステップにおいて、前記第2物質の配置領域をシミュレーションで指定することが好ましい。この方法により、モデル作成領域内における第2物質の配置位置の指定が容易となるので、第2物質のモデルを複数用いる場合であっても、効率的に第2物質を配置することが可能となる。

[0011] 本発明の特定物質の解析用モデルの作成方法においては、前記第1物質が、高分子材料であることが好ましい。この方法により、高分子材料を含有する特定物質の解析用モデルを作成することが可能となる。

[0012] 本発明の特定物質の解析用モデルの作成方法においては、前記第2物質が、フィラーであることが好ましい。この方法により、フィラーを含有する特定物質の解析用モデルを作成することが可能となる。

[0013] 本発明の特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラムは、上記特定物質の解析用モデルの作成方法をコンピュータに実行させることを特徴とする。

[0014] この特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラムによれば、設定したモデル作成領域内に第1物質のモデルを作成し、作成した第1物質のモデル内に空隙を設けて第2物質を配置するので、2種類以上の物質を含有する特定物質のモデルを効率的に作成することが可能となり、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる特定物質の解析用モデルを作成で

きる。

[0015] 本発明の特定物質のシミュレーション方法は、上記特定物質の解析用モデルの作成方法で作成した前記第1物質のモデルと前記第2物質のモデルとの間に相互作用を設定し、分子動力学法を用いて緩和計算を実行することを特徴とする。

[0016] この特定物質のシミュレーション方法によれば、第1物質及び第2物質を含有する特定物質の解析用モデル中での前記第1物質のモデルと前記第2物質のモデルとの間の不安定構造が解消され、平衡状態が得られるので、前記第1物質のモデルと前記第2物質のモデルとの配置が材料特性に及ぼす影響を解析することが可能となる。

[0017] 本発明の特定物質のシミュレーション方法は、上記特定物質の解析用モデルの作成方法で作成した特定物質の解析用モデルを用いて変形解析を実行することを特徴とする。

[0018] この特定物質のシミュレーション方法によれば、第1物質及び第2物質を含有する特定物質の解析用モデルを用いて変形解析を実行するので、特定物質の形状が材料特性に及ぼす影響を解析することが可能となり、コンパウンドの力学特性を得ることが可能となる。

[0019] 本発明の特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラムは、上記特定物質のシミュレーション方法をコンピュータに実行させることを特徴とする。

[0020] この特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラムによれば、2種類以上の物質を含有する特定物質の解析用モデルを効率的に作成でき、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる。

発明の効果

[0021] 本発明によれば、2種類以上の物質を含有する特定物質の解析用モデルを効率的に作成でき、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム、特定物質のシミュレーション方法及び特定物質のシミュ

レーション用コンピュータプログラムを実現できる。

図面の簡単な説明

[0022] [図1A]図 1 Aは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成される解析用モデルの一例を示す概念図である。

[図1B]図 1 Bは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成される解析用モデルの他の例を示す概念図である。

[図1C]図 1 Cは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成される解析用モデルの他の例を示す概念図である。

[図2A]図 2 Aは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の説明図である。

[図2B]図 2 Bは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の説明図である。

[図2C]図 2 Cは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の説明図である。

[図2D]図 2 Dは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の説明図である。

[図2E]図 2 Eは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の説明図である。

[図3A]図 3 Aは、本実施の形態に係るフィラーモデルの配置の説明図である。

[図3B]図 3 Bは、本実施の形態に係るフィラーモデルの配置の説明図である。

[図4]図 4 は、本発明の実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法及び特定物質のシミュレーション方法を実行する解析装置の機能ブロック図である。

[図5]図 5 は、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の一例の概略を示すフロー図である。

発明を実施するための形態

[0023] 以下、本発明の一実施の形態について、添付図面を参照して詳細に説明する。なお、本発明は、以下の実施の形態に限定されるものではなく、適宜変更して実施可能である。

[0024] 本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法は、コンピュータを用いて分子動力学法により少なくとも2つの物質を含有する特定物質の解析用モデルを作成する特定物質の解析用モデルの作成方法であって、特定物質の解析用モデルを作成するモデル作成領域を設定する第1ステップと、モデル作成領域内に第1物質のモデルを作成する第2ステップと、モデル作成領域内に第2物質の配置領域を設定する第3ステップと、第2物質の配置領域内の第1物質のモデルを当該第2物質の配置領域から排除して第2物質を配置する空隙を作成する第4ステップと、空隙に第2物質を配置して特定物質の解析用モデルを作成する第5ステップと、を含む。まず、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の概要について説明する。

[0025] 図1Aは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成される解析用モデル1の一例を示す概念図である。図1Aに示すように、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデル1は、一辺の長さが距離 L_1 の略立方体状の仮想空間であるモデル作成領域A1内でフィラーモデル11及びポリマーモデル12が配置されて解析対象となる特定物質がモデル化されたものである。なお、本実施の形態では、解析対象となる特定物質がフィラー（第1物質）及び高分子材料であるポリマー（第2物質）を含有する複合材料である例について説明するが、本発明は、2種類の物質を含有する複合材料以外にも各種材料に適用可能である。

[0026] 図1Bは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成される解析用モデルの他の例を示す概念図である。図1Bに示す解析用モデル2では、図1に示した解析用モデル1のフィラーモデル11に代えてモデル作成領域A1に第1のフィラーモデル11Aと第2のフィラーモデル11Bとがフィラーモデル化されている。第1のフィラーモデル11A及び第2のフィラーモデル11Bは、複数のフィラー粒子11aがそれぞれ略球体に

集合して構成される。また、第1のフィラーモデル11Aと第2のフィラーモデル11Bとは、相互に凝集して外縁部の一部が連結（共有）されている。

[0027] 図1Cは、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成される解析用モデルの他の例を示す概念図である。図1Cに示す解析用モデル3では、図1に示した解析用モデル1のフィラーモデルに代えてモデル作成領域A1内で第1のフィラーモデル11Aと第2のフィラーモデル11Bと第3のフィラーモデル11Cと第4のフィラーモデル11Dとがモデル化されている。第1のフィラーモデル11A、第2のフィラーモデル11B、第3のフィラーモデル11C及び第4のフィラーモデル11Dは、複数のフィラー粒子11aがそれぞれ略球状体に集合して構成される。第1のフィラーモデル11Aと第2のフィラーモデル11Bとの間は、相互に凝集して外縁部の一部が連結（共有）されている。第2のフィラーモデル11Bと第3のフィラーモデル11Cとの間は、相互に凝集して外縁部の一部が連結（共有）されている。第3のフィラーモデル11Cと第4のフィラーモデル11Dとの間は、相互に凝集して外縁部の一部が連結（共有）されている。第1のフィラーモデル11Aと第4のフィラーモデル11Dとの間は、相互に凝集して外縁部の一部が近接している。このように、本実施の形態によれば、2つの第1のフィラーモデル11A及び第2のフィラーモデル11Bが凝集した複雑な形状の解析用モデル2及び4つの第1のフィラーモデル11A、第2のフィラーモデル11B、第3のフィラーモデル11C、及び第4のフィラーモデル11Dが凝集した複雑な形状の解析用モデル3を作成することも可能である。

[0028] フィラーとしては、例えば、カーボンブラック、シリカ、及びアルミナなどが含まれる。フィラーモデル11は、複数のフィラー原子及び複数のフィラー原子の集合体としてのフィラー粒子11aが集合した略球状体としてモデル化される。フィラー粒子11aは、複数のフィラー粒子11a間の結合鎖（不図示）によって相対位置が特定されている。この結合鎖（不図示）は

、フィラー粒子 1 1 a 間の結合距離である平衡長とばね定数とが定義されたバネとしての機能を有し、各フィラー粒子 1 1 a 間を拘束している。結合鎖は、フィラー粒子 1 1 a の相対位置及び捻り、曲げなどによって力が発生するポテンシャルが定義されているボンドである。このフィラーモデル 1 1 は、フィラーを分子動力学で取り扱うための数値データ（フィラー粒子 1 1 a の質量、体積、直径及び初期座標などを含む）である。フィラーモデル 1 1 の数値データは、コンピュータに入力される。

[0029] ポリマーとしては、例えば、ゴム、樹脂、及びエラストマーなどが含まれる。このポリマーモデル 1 2 は、複数のポリマー原子及び複数のポリマー原子の集合体であるポリマー粒子 1 2 a が結合鎖 1 2 b を介して連結されたものである。なお、図 1 A～図 1 C においては、モデル作成領域に一つのポリマーモデル 1 2 を示しているが、ポリマーモデル 1 2 は、モデル作成領域 A 1 内で所定密度となるように多数充填されている。ポリマー粒子 1 2 a は、複数のポリマー粒子 1 2 a 間の結合鎖 1 2 b によって相対位置が特定されている。この結合鎖 1 2 b は、ポリマー粒子 1 2 a 間の結合距離である平衡長とばね定数とが定義されたバネとしての機能を有し、各ポリマー粒子 1 2 a 間を拘束している。結合鎖 1 2 b は、ポリマー粒子 1 2 a の相対位置及び捻り、曲げなどによって力が発生するポテンシャルが定義されているボンドである。このポリマーモデル 1 2 は、ポリマーを分子動力学で取り扱うための数値データ（ポリマー粒子 1 2 a の質量、体積、直径及び初期座標などを含む）である。ポリマーモデル 1 2 の数値データは、コンピュータに入力される。

[0030] また、ポリマーには、フィラーとの親和性を高める変性剤が必要に応じて配合される。この変性剤としては、例えば、水酸基、カルボニル基、及び原子団の官能基などが含まれる。

[0031] 次に、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法について詳細に説明する。図 2 A～図 2 E は、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の説明図である。なお、図 2 A～図 2 E においては、図 1 A

に示した略立方体状のモデル作成領域 A 1 の正面の一部を示している。

[0032] 図 2 A に示すように、本実施の形態においては、第 1 ステップでは、解析対象となる特定物質のモデルを作成する仮想空間である計算領域 A 2 内に一辺が長さ L 1 の略立方体状のモデル作成領域 A 1 を設定する。このモデル作成領域 A 1 は、作成する特定物質のモデルの形状に応じて任意形状に設定することが可能である。モデル作成領域 A 1 の形状としては、例えば、略球体状、楕円体状、円錐状、円柱状、三角柱状、立方体状、直方体状、及び多面体状などが挙げられる。これらの中でも、モデル作成領域 A 1 の形状としては、計算効率を向上する観点から、立方体状及び直方体状が好ましく、立方体状がより好ましい。モデル作成領域 A 1 は、例えば、モデル作成領域 A 1 内に指定した特定点を中心座標とする所定の半径を有する略球状体として指定してもよい。また、モデル作成領域 A 1 は、モデル作成領域 A 1 内に指定した複数の特定点を各頂点座標とする多面体として指定してもよい。さらに、モデル作成領域 A 1 は、C A D などによる作図で作成した立体形状に基づいて指定してもよい。

[0033] 次に、図 2 B に示すように、第 2 ステップでは、モデル作成領域 A 1 内にポリマーモデル 1 2 を充填する。ポリマーモデル 1 2 は、複数のポリマー粒子 1 2 a が結合鎖 1 2 b などを通じて連結された分子鎖が集合した状態で順次モデル作成領域 A 1 内に充填される。そして、ポリマーモデル 1 2 は、予め設定したポリマーの分子鎖長、ポリマーモデル 1 2 の分子鎖数及びポリマーモデル 1 2 の分子鎖の密度などの条件を満たすまで充填される。

[0034] 次に、図 2 C に示すように、第 3 ステップでは、ポリマーモデル 1 2 を充填したモデル作成領域 A 1 内にフィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 を指定する。フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 の形状としては、例えば、フィラーモデル 1 1 の重心を中心とした略球体状、楕円体状、円錐状、円柱状、三角柱状、立方体状、直方体状、及び多面体状などが挙げられる。これらの中でも、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 の形状としては、計算効率を向上する観点から、立方体状及び直方体状が好ましく、立方体状がより好ましい。

フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 は、例えば、モデル作成領域 A 1 内に指定した特定点を中心座標とする所定の半径を有する略球状体として指定してもよい。また、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 は、モデル作成領域 A 1 内に指定した複数の特定点を各頂点座標とする多面体として指定してもよい。さらに、モデル作成領域 A 1 は、C A D などによる作図で作成した立体形状に基づいて指定してもよい。

[0035] 次に、図 2 D に示すように、第 4 ステップでは、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 内のポリマーモデル 1 2 を当該フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 から排除してフィラーモデル 1 1 を配置する空隙を作成する。ここでは、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 内のポリマーモデル 1 2 をフィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 外に移動させてフィラーモデル 1 1 を配置する空隙を作成する。また、配置するフィラーモデル 1 1 の体積に合わせてポリマーモデル 1 2 全体の体積を大きくすることにより、ポリマーモデル 1 2 の密度の変化を防ぐことができる。

[0036] 次に、図 2 E に示すように、第 5 ステップでは、作成したフィラーモデル 1 1 を配置する空隙にフィラーモデル 1 1 を配置して特定物質の解析用モデルを作成する。フィラーモデル 1 1 としては、別途作成したフィラーモデル 1 1 を用いてもよく、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 内にフィラー粒子 1 1 a を配置して配置領域 A 3 内でフィラーモデル 1 1 を作成してもよい。

[0037] また、第 3 ステップでは、コンピュータを用いた分子動力学法によるシミュレーションでフィラーモデル 1 1 の配置位置を指定することが好ましい。これにより、モデル作成領域 A 1 内におけるフィラーモデル 1 1 の配置位置の指定が容易となるので、複数のフィラーモデル 1 1 を配置する場合であっても、効率的にフィラーを配置することが可能となる。フィラーモデル 1 1 の位置を指定するシミュレーションとしては、乱数を用いるモンテカルロ法などが挙げられる。このシミュレーションにより複数のフィラーモデル 1 1 を配置する場合には、フィラー同士が相互に接触及び重複する場合には、再度乱数でフィラーモデル 1 1 の配置位置を指定してもよく、接触及び重複し

たフィラーモデル 1 1 同士を結合させて 1 つのフィラーモデル 1 1 としてもよい。

[0038] また、第 4 ステップにおいては、粗視化分子動力学法を用いてフィラーモデル 1 1 を配置する空隙を作成することが好ましい。この方法により、計算効率が向上するので、効率的に空隙を作成することが可能となる。この場合、空隙は、ポリマーモデル 1 2 に変位を与えてポリマーモデル 1 2 の位置を変更して作製してもよい。また、空隙は、フィラーモデル 1 1 の配置領域にフィラー粒子 1 1 a を配置し、配置したフィラー粒子 1 1 a とポリマーモデル 1 2 との斥力などの相互作用を利用して作成してもよい。

[0039] また、第 4 ステップにおいては、図 3 A に示すように、配置するフィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 に対して相対的に大きい空間をフィラーモデル 1 1 の配置するための空隙として指定してもよい。これにより、図 3 B に示すように、配置したフィラーモデル 1 1 とポリマーモデル 1 2 との間に隙間ができるので、フィラーモデル 1 1 の配置が容易となる。この場合、フィラーモデル 1 1 の配置後にフィラーモデル 1 1 とポリマーモデル 1 2 との間の隙間にポリマーモデル 1 2 を充填することにより、図 2 E に示した例と同様に特定物質の解析用モデルを作成することができる。

[0040] 次に、本実施の形態に係るシミュレーション方法について説明する。本実施の形態に係るシミュレーション方法は、上記実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法で作成した解析用モデルを用いたシミュレーション方法である。シミュレーション方法としては、フィラーモデル 1 1 とポリマーモデル 1 2 との間に相互作用を設定し、分子動力学法を用いて緩和計算を実行するシミュレーション方法及び特定物質の解析用モデルを用いた伸長解析及びせん断変形解析などの変形解析が挙げられる。

[0041] 本実施の形態に係るシミュレーション方法においては、緩和計算を行う場合には、ポリマー粒子 1 2 a 間の距離の伸びきり長が定義されていないポテンシャルを使用することが好ましい。これにより、隣接するポリマーモデル 1 2 がポリマー粒子 1 2 a 間で絡まっても解けやすくなるので、ポリマーモ

デル12の絡まりによって作用する大きな力を抑制することができるので、計算落ちの発生を防ぐことができる。また、変形解析を行う場合には、ポリマー粒子12a間の距離の伸びきり長が定義されているポテンシャルを使用することが好ましい。これにより、伸びきり長以上のポリマー粒子12a間距離が許容されずに分子動力学計算が行われるので、ポリマーの分子運動に近似させて、変形解析することができ、シミュレーションの精度が向上する。

[0042] 次に、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法及び特定物質のシミュレーション方法について詳細に説明する。図4は、本発明の実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法及び特定物質のシミュレーション方法を実行する解析装置の機能ブロック図である。図4に示すように、本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法及び特定物質のシミュレーション方法は、処理部52と記憶部54とを含むコンピュータである解析装置50が実現する。この解析装置50は、入力手段53を備えた入出力装置51と電氣的に接続されている。入力手段53は、特定物質の解析用モデルの作成対象であるポリマー及びフィラーの各種物性値及び解析における境界条件などを処理部52又は記憶部54へ入力する。入力手段53としては、例えば、キーボード、マウスなどの入力デバイスが用いられる。

[0043] 処理部52は、例えば、中央演算装置（CPU：Central Processing Unit）及びメモリを含む。処理部52は、各種処理を実行する際にコンピュータプログラムを記憶部54から読み込んでメモリに展開する。メモリに展開されたコンピュータプログラムは、各種処理を実行する。例えば、処理部52は、記憶部54から予め記憶された各種処理に係るデータを必要に応じて適宜メモリ上の自身に割り当てられた領域に展開し、展開したデータに基づいて特定物質の解析用モデルの作成及び特定物質の解析用モデルを用いた特定物質のシミュレーションに関する各種処理を実行する。

[0044] 処理部52は、モデル作成部52aと、条件設定部52bと、解析部52

cとを含む。モデル作成部52aは、予め記憶部54に記憶されたデータに基づき、分子動力学法により特定物質の解析用モデルを作成する際のフィラー及びポリマーなどの特定物質の粒子数、分子数、分子量、分子鎖長、分子鎖数、分岐、形状、大きさ、反応時間、反応条件及び作成する解析用モデルに含まれる分子数である目標分子数などの構成要素の配置、設定及び計算ステップ数などの粗視化モデルの設定、分子鎖間などの相互作用などの各種計算パラメーターの初期条件の設定を行う。

[0045] フィラー粒子11a間の相互作用及びポリマー粒子12a間の相互作用を調整する計算パラメーターとしては、下記式(1)で表されるレナード・ジョーンズポテンシャルの σ 、 ϵ を用い、これらが調整される。ポテンシャルを計算する上限距離(カットオフ距離)を大きくすることで、遠距離まで働いた引力、斥力を調整できる。なお、フィラー粒子11a間の相互作用及びポリマー粒子12a間の相互作用が一定値になるまで順次、フィラー粒子11a間の相互作用及びポリマー粒子12a間の相互作用のパラメーターを小さくすることが好ましい。レナード・ジョーンズポテンシャルの σ 、 ϵ を大きな値から徐々に本来の値に近づけることにより、分子を不自然な状態に導かない穏やかな速度で粒子の接近を行うことができる。また、カットオフ距離も徐々に小さくすることにより、適正な範囲で引力、斥力を調整できる。

[数1]

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

[0046] モデル作成部52aは、初期条件の設定の後、平衡化計算を行う。平衡化計算では、所定の温度、密度及び圧力で、初期設定後の各種構成要素が平衡状態に到達する所定の時間、分子動力学計算を行う。そして、モデル作成部52aは、初期条件の設定及び平衡化の計算処理後に、計算領域A2内に特定物質の解析用モデルを作成するモデル作成領域A1を任意形状の領域として設定する。ここでは、モデル作成部52aは、モデル作成領域A1として

は、例えば、略球体状、楕円体状、円錐状、円柱状、三角柱状、立方体状、直方体状、及び多面体状など任意形状の領域を指定する。

[0047] 次に、モデル作成部52aは、作成したモデル作成領域A1内に複数のポリマー粒子12aによって構成されたポリマーモデル12を配置する。ここでは、モデル作成部52aは、複数のポリマー粒子12aが結合鎖12bなどを介して連結された分子鎖が集合した状態で順次モデル作成領域A1内にポリマーモデル12を充填する。また、モデル作成部52aは、予め設定したポリマーの分子鎖長、ポリマーモデル12の分子鎖数及びポリマーモデル12の分子鎖の密度などの条件を満たすまでポリマーモデル12を充填する。また、モデル作成部52aは、必要に応じてポリマーにフィラーとの親和性を高める水酸基、カルボニル基、及び原子団の官能基などの変性剤を配合してもよい。

[0048] 次に、モデル作成部52aは、ポリマーモデル12を充填したモデル作成領域A1内にフィラーモデル11の配置領域A3を設定する。また、モデル作成部52aは、フィラーモデル11の配置領域A3の形状としては、例えば、フィラーモデル11の重心を中心とした略球体状、楕円体状、円錐状、円柱状、三角柱状、立方体状、直方体状、及び多面体状などとして設定する。モデル作成部52aは、モデル作成領域A1内に指定した特定点を中心座標とする所定の半径を有する略球状体としてフィラーモデル11の配置領域A3を指定する。また、モデル作成部52aは、モデル作成領域A1内に指定した複数の特定点を各頂点座標とする多面体としてフィラーモデル11の配置領域A3を指定する。さらに、モデル作成部52aは、モデル作成領域A1は、CADなどによる作図で作成した立体形状に基づいてフィラーモデル11の配置領域A3を指定する。また、モデル作成部52aは、コンピュータを用いた分子動力学法による乱数を用いるモンテカルロ法などのシミュレーションでフィラーモデル11の配置位置を指定してもよい。

[0049] 次に、モデル作成部52aは、フィラーモデル11の配置領域A3内のポリマーモデル12を当該フィラーモデル11の配置領域A3から排除してフ

ィラーモデル 1 1 を配置する空隙を作成する。ここでは、モデル作成部 5 2 a は、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 内のポリマーモデル 1 2 をフィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 外に移動させてフィラーモデル 1 1 を配置する空隙を作成する。また、モデル作成部 5 2 a は、粗視化分子動力学法を用いてフィラーモデル 1 1 を配置する空隙を作成してもよい。

[0050] 次に、モデル作成部 5 2 a は、作成したフィラーモデル 1 1 を配置する空隙にフィラーモデル 1 1 を配置して特定物質の解析用モデルを作成する。ここでは、モデル作成部 5 2 a は、別途作成したフィラーモデル 1 1 を配置してもよく、フィラーモデル 1 1 の配置領域 A 3 内にフィラー粒子 1 1 a を配置して配置領域 A 3 内でフィラーモデル 1 1 を作成してもよい。

[0051] 条件設定部 5 2 b は、モデル作成部 5 2 a で作成した特定物質の解析用モデル及びポリマーモデル 1 2 を用いた分子動力学法による運動シミュレーション（解析）を実行するための各種条件を設定する。条件設定部 5 2 b は、入力手段 5 3 からの入力及び記憶部 5 4 に記憶されている情報に基づいて各種条件を設定する。各種条件としては、解析を実行するフィラーの位置及び数、フィラー原子、フィラー原子団、フィラー粒子及びフィラー粒子群の位置及び数、フィラー粒子番号、ポリマーの分子鎖の位置及び数、ポリマー原子、ポリマー原子団、ポリマー粒子及びポリマー粒子群の位置及び数、ポリマー粒子番号、予め設定した物理量履歴である応力ひずみ曲線及び条件を変更しない固定値などが含まれる。

[0052] 解析部 5 2 c は、モデル作成部 5 2 a により作成されたフィラーモデル 1 1 及びポリマーモデル 1 2 を含む特定物質の解析用モデルを用いた分子動力学法による緩和計算、伸長解析、剪断解析などの変形解析などの運動シミュレーションを実行して各種物理量を取得する。ここでの運動シミュレーションとしては、例えば、伸長解析及びせん断解析などが挙げられる。また、ここでの物理量としては、シミュレーションの結果得られる運動変位及び公称応力又は運動変位を演算して得られる公称ひずみなどが挙げられる。これにより、任意に作成した複雑な形状のフィラーモデル 1 1 をポリマーモデル 1

2中に配置するので、フィラーの形状がポリマーに及ぼす影響を解析することが可能となり、フィラーモデル11の挿入により生じた不安定構造を解消して平衡状態が得られる。さらに、任意に作成した複雑な形状の特定物質の解析用モデルを用いて変形解析を実行するので、特定物質の形状が材料特性に及ぼす影響を解析することが可能となり、コンパウンドの力学特性を得ることが可能となる。

[0053] 記憶部54は、ハードディスク装置、光磁気ディスク装置、フラッシュメモリ及びCD-ROMなどの読み出しのみが可能な記録媒体である不揮発性のメモリ、並びに、RAM(Random Access Memory)のような読み出し及び書き込みが可能な記録媒体である揮発性のメモリが適宜組み合わせられる。

[0054] 記憶部54には、入力手段53を介して解析対象となる特定物質の解析用モデルを作成するためのデータであるゴムカーボンブラック、シリカ、及びアルミナなどのフィラーのデータ、ゴム、樹脂、及びエラストマーなどのポリマーのデータ、予め設定した物理量履歴である応力ひずみ曲線及び本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法、特定物質のシミュレーション方法を実現するためのコンピュータプログラムなどが格納されている。このコンピュータプログラムは、コンピュータ又はコンピュータシステムに既に記録されているコンピュータプログラムとの組み合わせによって、本実施の形態に係る特定物質のシミュレーション方法を実現できるものであってもよい。ここでいう「コンピュータシステム」とは、OS(Operating System)及び周辺機器などのハードウェアを含むものとする。

[0055] 表示手段55は、例えば、液晶表示装置等の表示用デバイスである。なお、記憶部54は、データベースサーバなどの他の装置内にあってもよい。例えば、解析装置50は、入出力装置51を備えた端末装置から通信により処理部52及び記憶部54にアクセスするものであってもよい。

[0056] 次に、図5を参照して本実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法の具体例について説明する。図5は、本実施の形態に係る特定物質の解

析用モデルの作成方法の一例の概略を示すフロー図である。

[0057] 図5に示すように、開始時には、モデル作成部52aが、入力手段53を介して予め記憶部54に記憶されたフィラー及びポリマーをモデル化するためのデータであるフィラー及びポリマーなどの特定物質の粒子数、分子数、分子量、分子鎖長、分子鎖数、分岐、形状、大きさ、反応時間、反応条件及び作成する解析用モデルに含まれる分子数である目標分子数などの構成要素の配置、予め設定した物理量履歴である応力ひずみ曲線及び条件を変更しない固定値などのフィラー及びポリマーをモデル化するための各種データを読み込む。続いて、モデル作成部52aは、各種データに基づいて、初期条件の設定及び分子動力学計算により平衡化計算を行う。

[0058] 次に、モデル作成部52aは、仮想空間である計算領域A2内に特定物質のモデル作成領域A1を設定する（ステップST1）。次に、モデル作成部52aは、モデル作成領域A1内に、予め設定したポリマーモデル12の分子鎖長、ポリマーモデル12の分子鎖数及びポリマーモデル12の分子鎖数の密度などのポリマーモデル12の作成条件に基づいてポリマーモデル12を作成する（ステップST2）。次に、モデル作成部52aは、ポリマーモデル12を作成したモデル作成領域A1内に必要数のフィラーモデル11の配置領域A3を設定する（ステップST3）。

[0059] 次に、モデル作成部52aは、フィラーモデル11の配置領域A3内のポリマーモデル12をフィラーモデル11の配置領域A3内から排除してフィラーモデル11を配置するための空隙を作成する（ステップST4）。次に、モデル作成部52aは、フィラーモデル11の配置領域A3内にフィラーモデル11を配置して特定物質の解析用モデルを作成する（ステップST5）。ここでは、モデル作成部52aは、別途作成したフィラーモデル11をモデル作成領域A1内に配置してもよく、モデル作成領域A1内でフィラーモデル11を作成してもよい。また、モデル作成部52aは、作成した特定物質の解析用モデルのデータを記憶部54に格納して特定物質の解析用モデルの作成を終了する。

[0060] 次に、条件設定部 5 2 b は、入力手段 5 3 からの入力又は記憶部 5 4 に記憶されている情報に基づいて、フィラーの解析用モデルを用いた分子動力学法による運動シミュレーション（解析）の条件を設定する。次に、解析部 5 2 c は、条件設定部 5 2 b によって設定された条件に基づいて、モデル作成部 5 2 a によって作成されたフィラーの解析用モデルを用いて緩和計算及び変形解析などの解析を行い公称応力及び公称ひずみなどの物理量を取得する。また、解析部 5 2 c は、緩和計算及び変形解析などによって得られた解析結果を記憶部 5 4 に格納する。

[0061] 以上説明したように、上記実施の形態に係る特定物質の解析用モデルの作成方法によれば、設定したモデル作成領域 A 1 内にポリマーモデル 1 2 を作成し、作成したポリマーモデル 1 2 内に空隙を設けてフィラーモデル 1 1 を配置するので、モデル内に配置するフィラーモデル 1 1 の数が多い場合であっても、2 種類以上の物質を含有する特定物質のモデルを効率的に作成することが可能となる。これにより、特定物質の材料特性に及ぼす影響を正確に解析できる特定物質の解析用モデルの作成方法を実現できる。

符号の説明

- [0062] 1, 2, 3 解析用モデル
- 1 1 フィラーモデル
 - 1 1 a フィラー粒子
 - 1 2 ポリマーモデル
 - 1 2 a ポリマー粒子
 - 5 0 解析装置
 - 5 1 入出力装置
 - 5 2 処理部
 - 5 2 a モデル作成部
 - 5 2 b 条件設定部
 - 5 2 c 解析部
 - 5 3 入力手段

5 4 記憶部

5 5 表示手段

請求の範囲

- [請求項1] コンピュータを用いて分子動力学法により少なくとも2つの物質を含有する特定物質の解析用モデルを作成する特定物質の解析用モデルの作成方法であって、
- 特定物質の解析用モデルを作成するモデル作成領域を設定する第1ステップと、
- 前記モデル作成領域内に第1物質のモデルを作成する第2ステップと、
- 前記モデル作成領域内に第2物質の配置領域を設定する第3ステップと、
- 前記第2物質の配置領域内の前記第1物質のモデルを当該第2物質の配置領域から排除して前記第2物質を配置する空隙を作成する第4ステップと、
- 前記空隙に前記第2物質を配置して前記特定物質の解析用モデルを作成する第5ステップと、
- を含むことを特徴とする、特定物質の解析用モデルの作成方法。
- [請求項2] 前記第2ステップにおいて、粗視化分子動力学法を用いて前記第2物質を配置する前記空隙を作成する、請求項1に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法。
- [請求項3] 前記第2ステップにおいて、前記第2物質の配置領域をシミュレーションで指定する、請求項1又は請求項2に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法。
- [請求項4] 前記第1物質が、高分子材料である、請求項1から請求項3のいずれか1項に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法。
- [請求項5] 前記第2物質が、フィラーである、請求項1から請求項4のいずれか1項に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法。
- [請求項6] 請求項1から請求項5のいずれか1項に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法をコンピュータに実行させることを特徴とする、特定

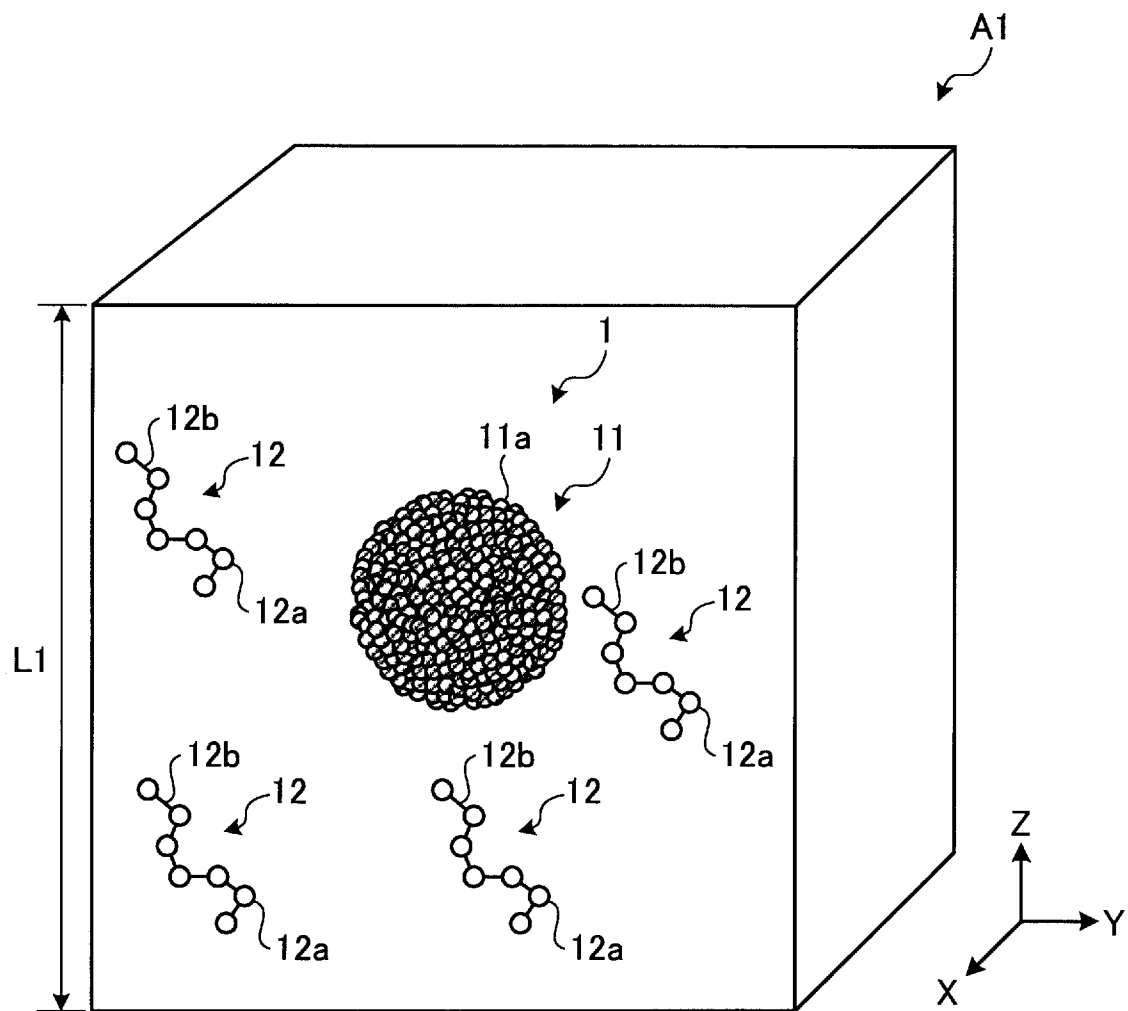
物質の解析用モデルの作成用コンピュータプログラム。

[請求項7] 請求項1から請求項5のいずれか1項に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法で作成した特定物質の解析用モデルの前記第1物質のモデルと前記第2物質のモデルとの間に相互作用を設定し、分子動力学法を用いて緩和計算を実行することを特徴とする特定物質のシミュレーション方法。

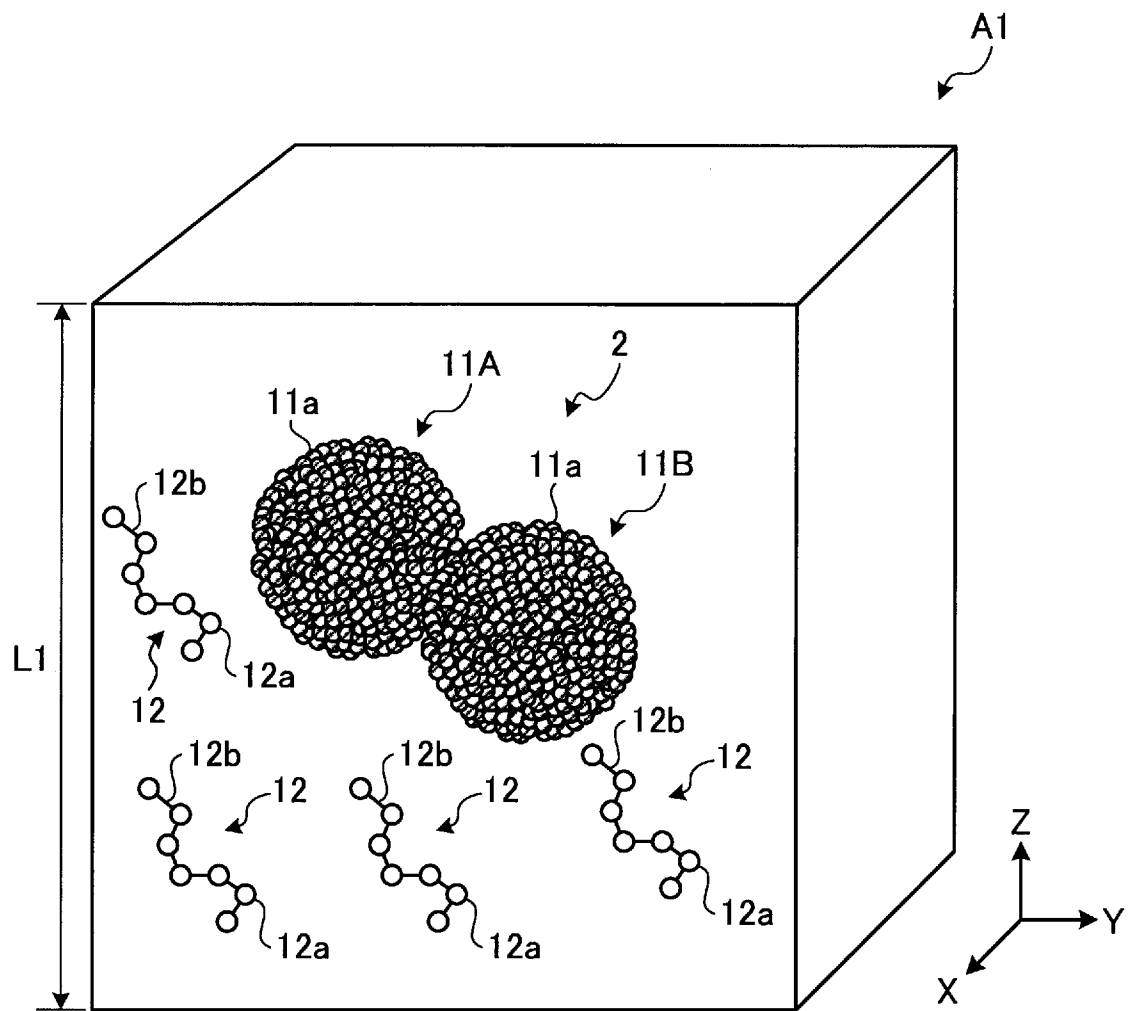
[請求項8] 請求項1から請求項5のいずれか1項に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法で作成した特定物質の解析用モデルを用いて変形解析を実行することを特徴とする、特定物質のシミュレーション方法。

[請求項9] 請求項7又は請求項8に記載の特定物質のシミュレーション方法をコンピュータに実行させることを特徴とする、特定物質のシミュレーション用コンピュータプログラム。

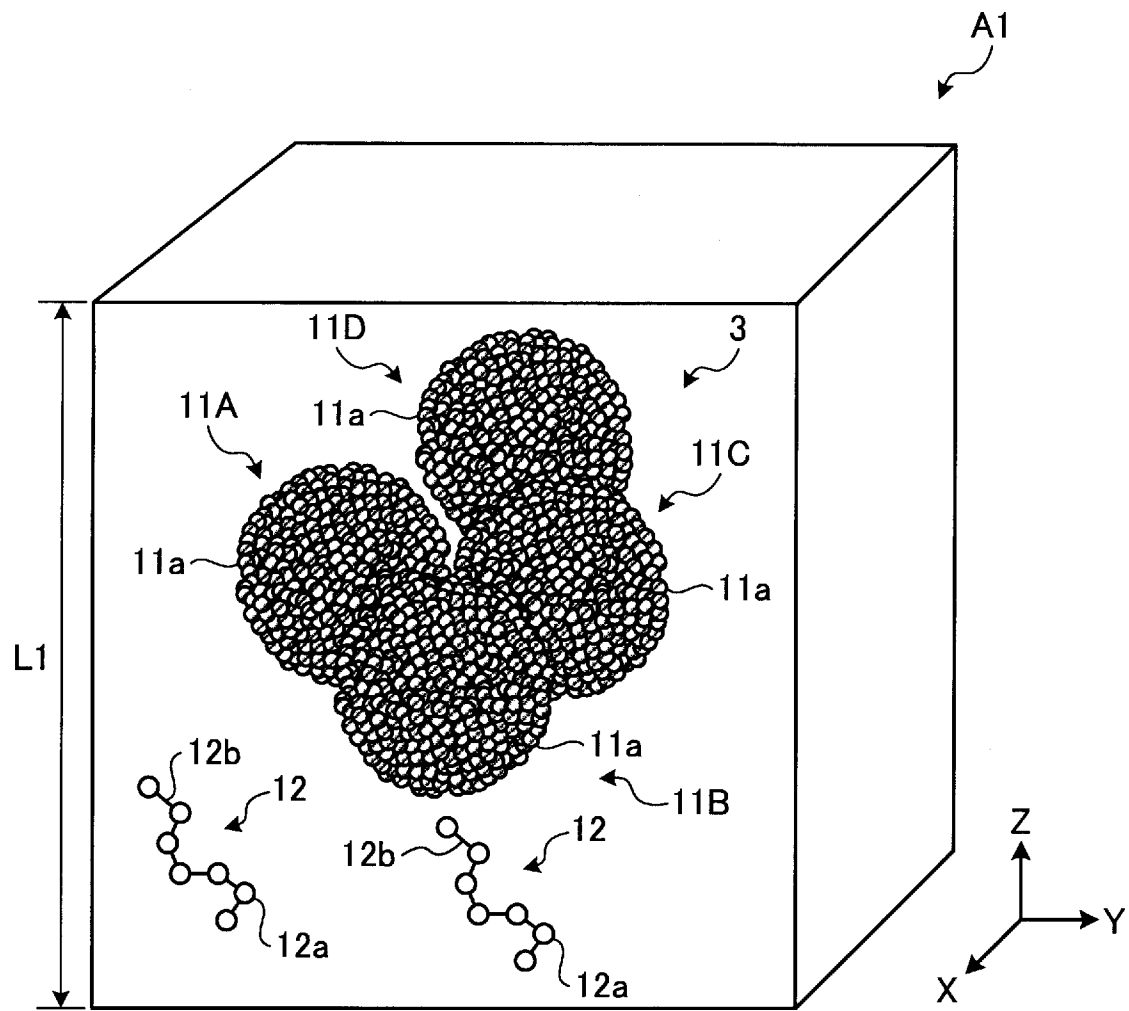
[図1A]



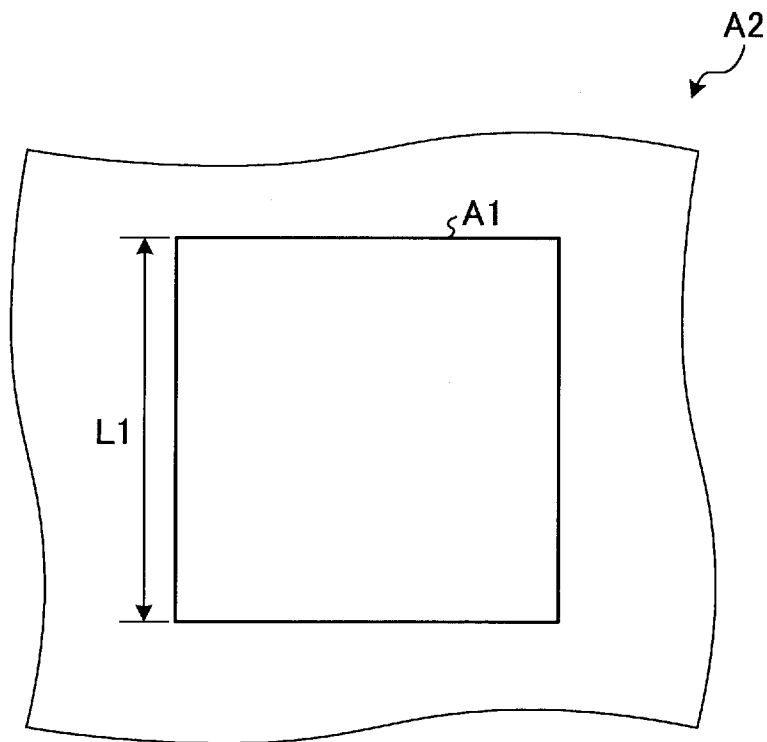
[図1B]



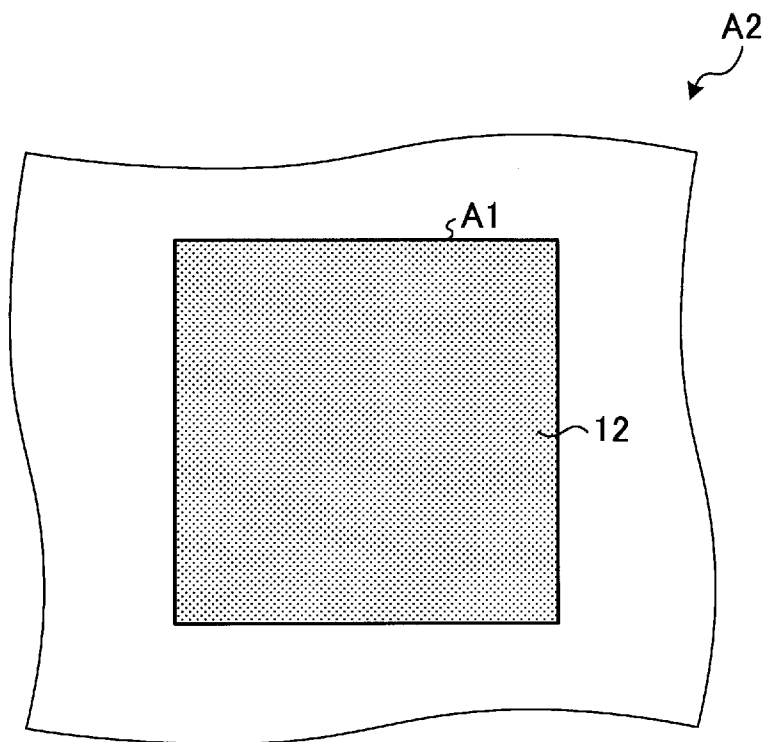
[図1C]



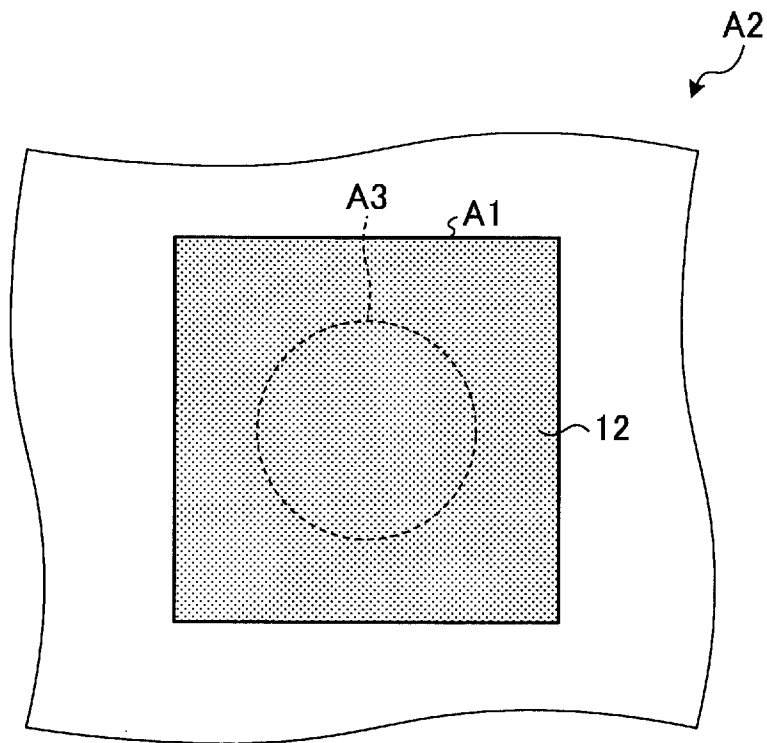
[図2A]



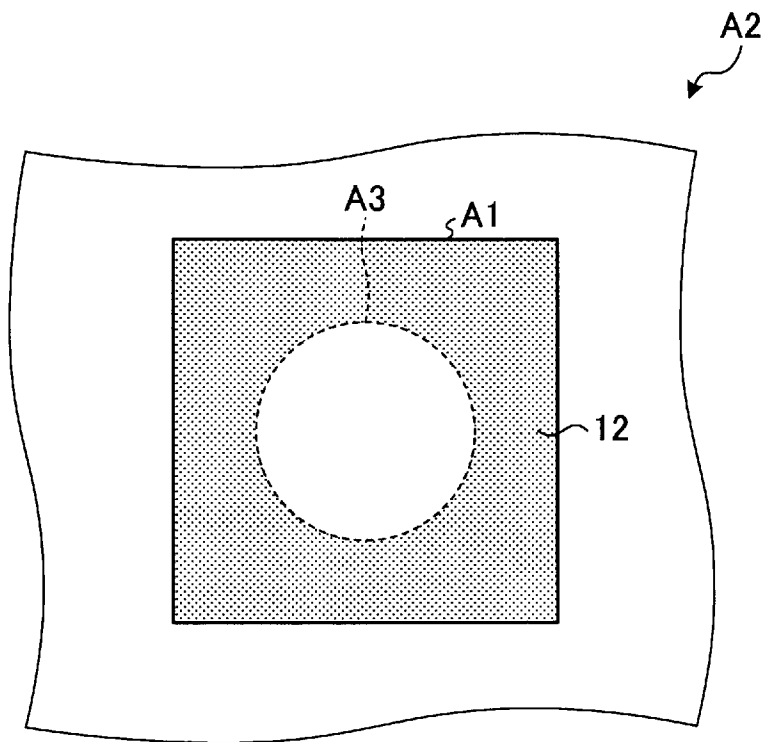
[図2B]



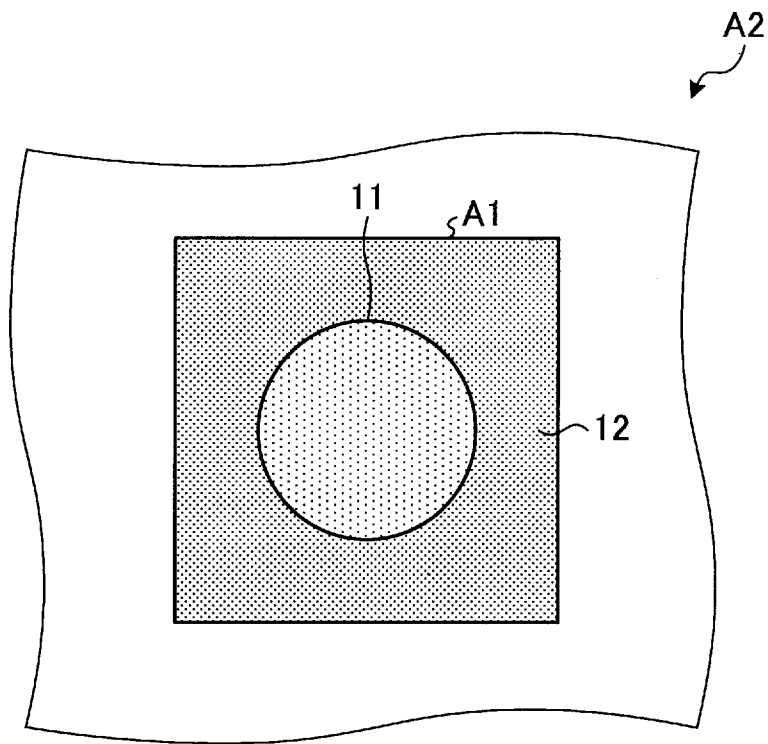
[図2C]



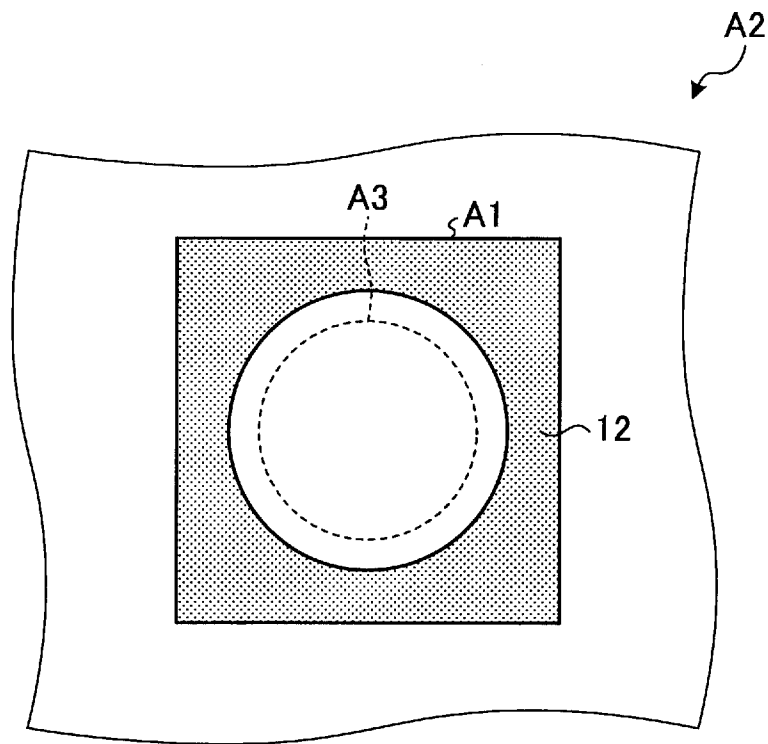
[図2D]



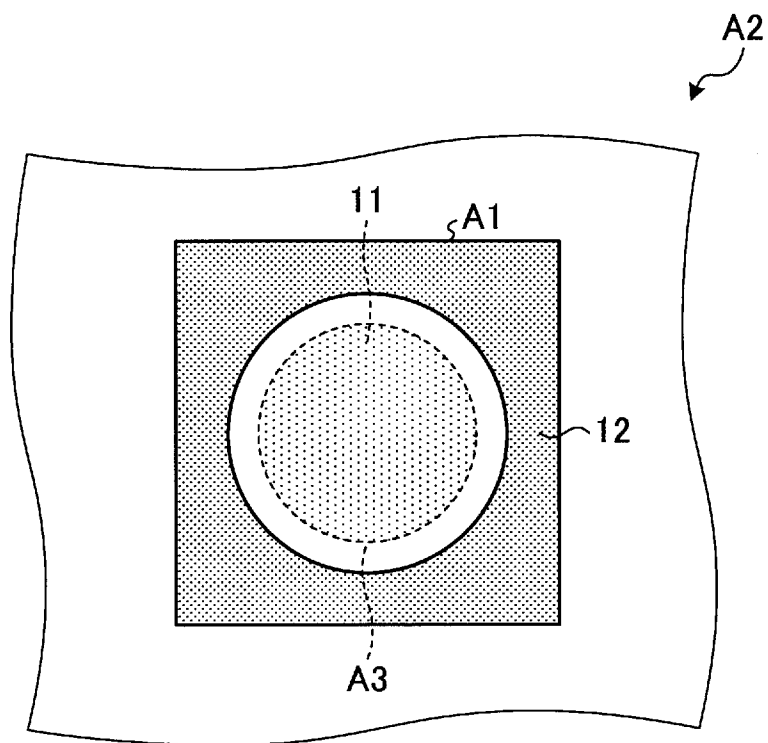
[図2E]



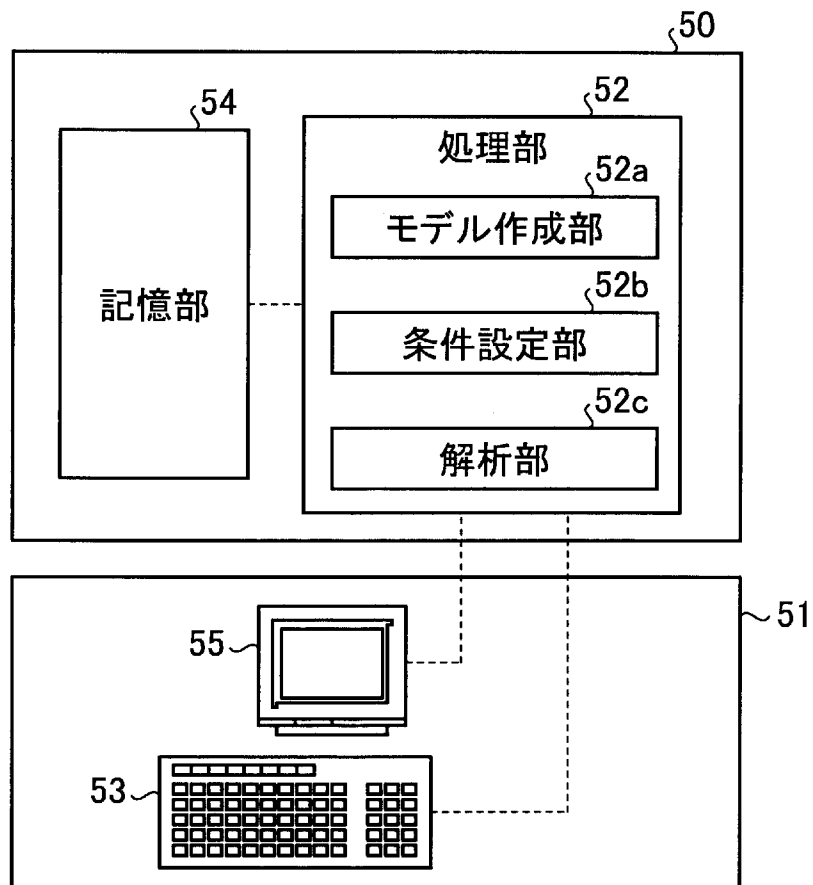
[図3A]



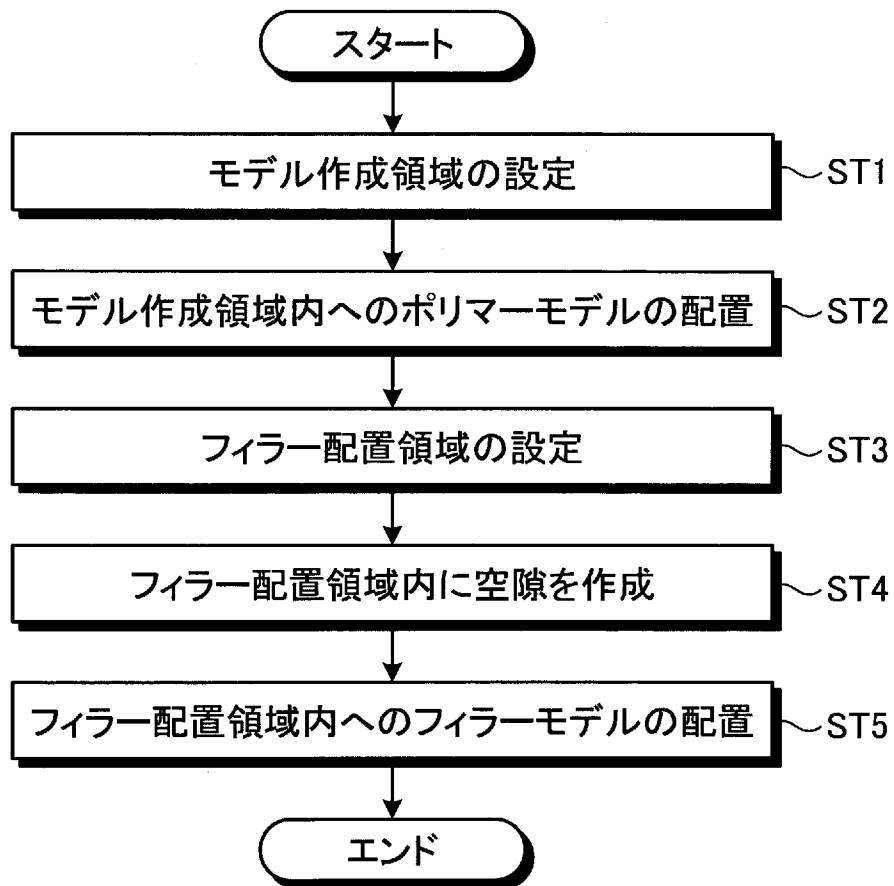
[図3B]



[図4]



[図5]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2015/071042

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N33/44(2006.01) i, G06F17/50(2006.01) i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01N33/44, G06F17/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2015
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2015	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2015

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamIII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2014-110000 A (Toyo Tire and Rubber Co., Ltd.), 12 June 2014 (12.06.2014), entire text; all drawings (Family: none)	1-9
A	JP 2009-193290 A (The Yokohama Rubber Co., Ltd.), 27 August 2009 (27.08.2009), entire text; all drawings (Family: none)	1-9

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
 "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
 "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
 "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
 "&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
24 September 2015 (24.09.15)

Date of mailing of the international search report
06 October 2015 (06.10.15)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2015/071042

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2013-089124 A (Sumitomo Rubber Industries, Ltd.), 13 May 2013 (13.05.2013), entire text; all drawings & US 2014/0257783 A1 & WO 2013/058155 A1 & EP 2752780 A1	1-9
A	JP 2010-181342 A (Bridgestone Corp.), 19 August 2010 (19.08.2010), entire text; all drawings & WO 2010/090294 A1	1-9

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（I P C））

Int.Cl. G01N33/44(2006.01)i, G06F17/50(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（I P C））

Int.Cl. G01N33/44, G06F17/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2015年
日本国実用新案登録公報	1996-2015年
日本国登録実用新案公報	1994-2015年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580（JDreamIII）

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2014-110000 A（東洋ゴム工業株式会社）2014.06.12, 全文、全図（ファミリーなし）	1-9
A	JP 2009-193290 A（横浜ゴム株式会社）2009.08.27, 全文、全図 （ファミリーなし）	1-9
A	JP 2013-089124 A（住友ゴム工業株式会社）2013.05.13, 全文、全 図 & US 2014/0257783 A1 & WO 2013/058155 A1 & EP 2752780 A1	1-9

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）

「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

24.09.2015

国際調査報告の発送日

06.10.2015

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（I S A/J P）

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官（権限のある職員）

赤坂 祐樹

2 J

3316

電話番号 03-3581-1101 内線 3252

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2010-181342 A (株式会社ブリヂストン) 2010.08.19, 全文、全図 & WO 2010/090294 A1	1-9