

(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 2016/013640 A1

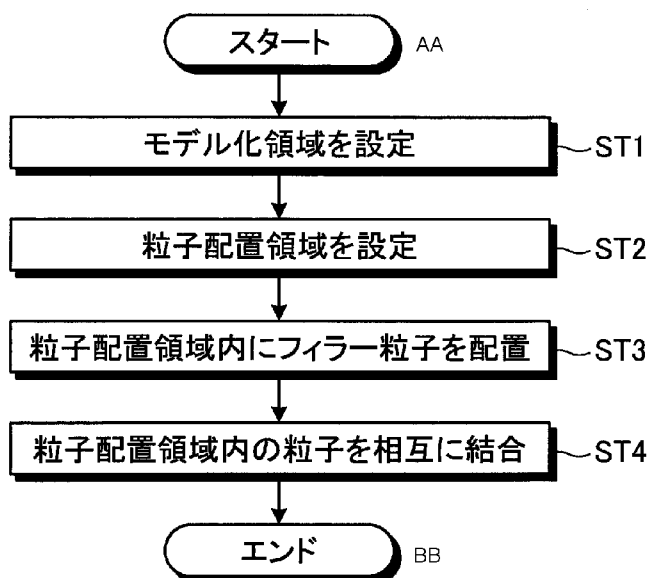
- (51) 国際特許分類:
G01N 33/44 (2006.01) *G06F 17/50* (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2015/071041
- (22) 国際出願日: 2015年7月23日(23.07.2015)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2014-151187 2014年7月24日(24.07.2014) JP
- (71) 出願人: 横浜ゴム株式会社 (THE YOKOHAMA RUBBER CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1058685 東京都港区新橋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).

[続葉有]

(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 modelling area
ST2 Set particle arrangement area
ST3 Arrange filler particles inside particle arrangement area
ST4 Join together particles inside particle 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 a model for analysis of any shape can be created and the effect of the shape of specific substances on material characteristics can be accurately analyzed. The method for creating analysis models for specific substances includes: a first step ST1 in which a modelling area is set; a second step ST2 in which a particle arrangement area inside which particles are arranged is set, said area including the entire modelling area; a third step ST3 in which particles are arranged at a specified density inside the particle arrangement area; and a fourth step ST4 in which the particles arranged inside the modelling area inside the particle arrangement area are joined together and a specific substance model is created.

(57) 要約:

[続葉有]

WO 2016/013640 A1



添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))

任意形状の解析用モデルを作成でき、特定物質の形状が材料特性に与える影響を正確に解析可能な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。特定物質の解析用モデルの作成方法は、モデル化領域を設定する第 1 ステップ S T 1 と、モデル化領域の全域を含む領域であって、領域内に粒子を配置する粒子配置領域を設定する第 2 ステップ S T 2 と、粒子配置領域内に指定密度で粒子を配置する第 3 ステップ S T 3 と、粒子配置領域内におけるモデル化領域内に配置された粒子を相互に結合させて特定物質のモデルを作成する第 4 ステップ S T 4 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、特定物質の形状が材料特性に与える影響を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、ポリマー及びカーボンブラックをフィラーとして含むゴム材料においては、ゴム中でカーボンブラックが凝集し、ゴムコンパウンドの材料特性に大きな影響を与える複雑な形状を有するフィラー構造体が形成される場合がある。このようなフィラー構造体が形成されたゴム材料の材料特性の形状を正確に解析するためには、フィラー構造体の形状に対応したフィラーモデルを作成する必要がある。しかしながら、従来の解析用モデルの作成方法では、複雑な形状のフィラーモデルを作成することは難しく、複合材料の材料特性を必ずしも十分に解析できない場合があった。

[0005] 本発明は、このような実情に鑑みてなされたものであり、任意形状の解析用モデルを作成でき、特定物質の形状が材料特性に与える影響を正確に解析可能な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

[0006] 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特定物質の形状が材料特性に与える影響を解析するための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、前記特定物質をモデル化するモデル化領域を設定する第1ステップと、前記モデル化領域の全体を含む領域であって、当該領域内に原子及び当該原子の集合体を含む粒子を配置する粒子配置領域を設定する第2ステップと、前記粒子配置領域内に指定密度で前記粒子を配置する第3ステップと、前記粒子配置領域内における前記モデル化領域内に配置された前記粒子を相互に結合させて前記特定物質のモデルを作成する第4ステップとを含むことを特徴とする。

[0007] この特定物質の解析用モデルの作成方法によれば、解析対象となる特定物質の形状に応じて任意形状のモデル化領域を指定するので、フィラーなどの複雑な形状を有する特定物質の解析用モデルを正確に作成することが可能となる。これにより、任意形状の解析用モデルを作成できるので、特定物質の

材料特性を正確に解析可能な特定物質の解析用モデルの作成方法を実現することが可能となる。しかも、粒子配置領域内における作成する特定物質の形状に対応したモデル化領域内に配置した粒子を結合させるので、計算領域の全域に粒子を配置する場合と比較して結合させる粒子数を削減することが可能となり、複雑な形状の特定物質の解析用モデルを作成することが可能となる。

[0008] 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3ステップにおいて、前記モデル化領域内に配置した前記粒子間の粒子間距離が予め定めた所定範囲の距離以下の場合に、前記粒子間に相互作用が生じるポテンシャルが定義されてなることが好ましい。前記第3ステップにおいて、前記粒子配置領域内に配置した前記粒子間の粒子間距離が予め定めた所定範囲の距離以下の場合に、前記粒子間に相互作用が生じるポテンシャルが定義されてなることが好ましい。この方法により、特定物質の粒子間に斥力などを用いることが可能となるので、粒子の分散状態を変化させることができ、より少ない粒子数で解析用モデルを作成でき、計算効率が向上する。

[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4ステップにおいて、前記粒子配置領域内の外縁部の前記粒子同士のみを相互に結合させることが好ましい。この方法により、解析用モデルの作成に要する粒子の結合点数を削減することができるので、演算処理に要する計算時間を短縮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、前記特定物質が、フィラーであることが好ましい。この方法により、複雑な形状のフィラーモデルを任意に作成することができるので、高分子材料におけるフィラーモデルの形状が材料特性に与える影響を正確に評価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。

[0012] 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、

解析対象となる特定物質の形状に応じて任意形状のモデル化領域を指定するので、フィラーなどの複雑な形状を有する特定物質の解析用モデルを正確に作成させることが可能となる。これにより、任意形状の解析用モデルを作成できるので、特定物質の材料特性を正確に解析可能な特定物質の解析用モデルの作成方法を実現することが可能となる。しかも、粒子配置領域内における作成する特定物質の形状に対応したモデル化領域内に配置した粒子を結合させるので、計算領域の全域に粒子を配置する場合と比較して結合させる粒子数を削減することが可能となり、複雑な形状の特定物質の解析用モデルを作成させることが可能となる。

[0013] 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、当該特定物質とは異なる他の特定物質の解析用モデル中に配置し、前記特定物質の解析用モデルと前記他の特定物質の解析用モデルとの間に相互作用を設定して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。

[0014] この特定物質のシミュレーション方法によれば、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他の特定物質の解析用モデル中に配置するので、解析用モデル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、特定物質の形状が他の特定物質に及ぼす影響を解析することが可能となる。

[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。

[0016] この特定物質のシミュレーション方法によれば、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。

[0017] 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。

[0018] 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、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たシミュレーションを実行できるので、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る。

発明の効果

[0019] 本発明によれば、任意形状の解析用モデルを作成でき、特定物質の形状が材料特性に与える影響を正確に解析可能な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

[0020] [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3]図3は、本実施の形態に係るフィラー粒子の結合の説明図である。

[図4]図4は、本実施の形態に係るフィラー粒子の結合の説明図である。

[図5A]図 5 A は、本実施の形態に係るシミュレーション方法の説明図である。

[図5B]図 5 B は、本実施の形態に係るシミュレーション方法の説明図である。

[図5C]図 5 C は、本実施の形態に係るシミュレーション方法の説明図である。

[図6]図 6 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7]図 7 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

[0021] 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。

[0022] 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特定物質の形状が材料特性に与える影響を解析するための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る。この特定物質の解析用モデルの作成方法は、特定物質をモデル化するモデル化領域を設定する第 1 ステップと、モデル化領域の全体を含む領域であって、当該領域内に原子及び当該原子の集合体である粒子を配置する粒子配置領域を設定する第 2 ステップと、粒子配置領域内に指定密度で粒子を配置する第 3 ステップと、粒子配置領域内におけるモデル化領域内に配置された粒子を相互に結合させて特定物質のモデルを作成する第 4 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。本実施の形態では、解析対象となる特定物質が各種高分子材料などに添加されるフィラーである場合について説明するが、特定物質としてはフィラーに限定されない。

[0023] 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フィラーモデル11（以下、「解析用モデル1」ともいう）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フィラーモデル11は、解析対象となるフィラーが一辺の長さが距離 L_1 の略立方体状の仮想空間であるモデル化領域A1内でモデル化されたものである。

[0024] 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に代えて計算領域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。

[0025] 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計算領域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。

[0026] 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（以下、「解析用モデル2」ともいう）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（以下、「解析用モデル3」ともいう）を作成することが可能となる。

[0027] 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11a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11a間を拘束している。結合鎖は、フィラー粒子11a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11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11a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11の数値データは、コンピュータに入力される。

[0028] 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2A～図2D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2A～図2Dにおいては、図1Aに示した略直方体状の計算領域A1の正面の一部を示している。

[0029] 図2Aに示すように、本実施の形態においては、まず、計算領域A1内に

解析対象となる特定物質であるフィラーをモデル化するモデル化領域 A 2 を設定する。このモデル化領域 A 2 は、全域が計算領域 A 1 に含まれる領域である。また、モデル化領域 A 2 は、作成するフィラーモデル 1 1 の形状に対応して計算領域 A 1 内に任意形状の領域として設定する。本実施の形態では、モデル化領域 A 2 は、図 1 A に示した解析用モデル 1 の形状に対応するように、1 つの略球体状の領域として設定する。なお、モデル化領域 A 2 は、図 1 B に示した解析用モデル 2 の形状に対応するように、2 つの略球体状の領域の外縁部の一部が相互に共有される形状の領域として設定してもよい。さらに、モデル化領域 A 2 は、図 1 C に示した解析用モデル 3 の形状に対応するように、4 つの略球体状の領域の外縁部の一部が相互に共有される形状の領域として設定してもよい。また、モデル化領域 A 2 は、例えば、計算領域 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、モデル化領域 A 2 は、計算領域 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、モデル化領域 A 2 は、CAD 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。

[0030] 次に、図 2 B に示すように、フィラー原子及びフィラー原子の集合体としてのフィラー粒子 1 1 a を配置する粒子配置領域 A 3 を設定する。この粒子配置領域 A 3 は、モデル化領域 A 2 の全域を含む領域である。図 2 B に示す例では、粒子配置領域 A 3 としてモデル化領域 A 2 を中心とする略立方体状の領域を指定する例について説明したがこの構成に限定されない。粒子配置領域 A 3 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、粒子配置領域 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、直方体状がより好ましい。また、粒子配置領域 A 3 の形状としては、計算効率を向上する観点から、モデル化領域 A 2 の最大長に対して 1.5 倍以下が好ましく、1.3 倍以下がより好ましい。

[0031] 次に、図2Cに示すように、粒子配置領域A3内に指定密度でフィラー粒子11aを配置する。これにより、モデル化領域A2内の全域にも指定密度でフィラー粒子11aが配置される。ここでの指定密度とは、作成するフィラーモデル11内に充填されるフィラー粒子11aの密度である。ここでは、計算領域A1内の一部に設けた粒子配置領域A3内にフィラー粒子11aを配置するので、計算領域A1の全域にフィラー粒子11aを配置する場合と比較して配置するフィラー粒子11aを削減することが可能となる。この結果、フィラーモデル11の作成に要するフィラー粒子11aを削減することが可能となり、計算効率が向上する。

[0032] 次に、図2Dに示すように、粒子配置領域A3内におけるモデル化領域A2内に配置された複数のフィラー粒子11aを相互に結合させてフィラーモデル11を作成し、粒子配置領域A3外の粒子を削除する。ここでは、粒子配置領域A3内に配置された複数のフィラー粒子11aを相互に結合させてもよい。また、モデル化領域A2内のフィラー粒子11aを抽出し、抽出したフィラー粒子11aを相互に結合してもよく、モデル化領域A2外のフィラー粒子11aを削除してから残りのフィラー粒子11aを相互に結合してもよい。また、フィラー粒子11aを結合させる場合には、後述するフィラーモデル11を用いたシミュレーションでの解析時のフィラー粒子11aの形状を維持する観点から、結合鎖で強固に結合させることが好ましい。ここで、結合鎖による結合強度としては、例えば、フィラーモデル11を用いて解析を行う場合にフィラー粒子11a同士的位置を維持することが可能な程度の強度である。

[0033] なお、モデル化領域A2内にフィラー粒子11aを配置する際には、粒子配置領域A3内に配置したフィラー粒子11a間の粒子間距離が、予め定めた所定範囲の距離以下の場合にフィラー粒子11a間に相互作用が生じるポテンシャルがフィラー粒子11aに定義されることが好ましい。これにより、フィラー粒子11a間に引力及び斥力などを作用させることが可能となるので、粒子の分散状態を変化させることができる。特に、フィラー粒子11

a間に斥力を作用させることにより、フィラー粒子11a間の粒子間距離を大きくすることができるので、少ないフィラー粒子11a数でフィラーモデル11を作成でき、計算効率が向上する。ここで、ポテンシャルとは、フィラー粒子11a間の距離及び角度の関数であって、2つのフィラー粒子11a間に作用する力を計算する際に用いられる。ポテンシャルとしては、例えば、結合鎖で連結されたフィラー粒子11a間のボンドストレッチのポテンシャル、連続する3つのフィラー粒子11aで構成されるベンディングのポテンシャル、連続する3及び4つのフィラー粒子11aで構成されるトーシヨンのポテンシャル、及び、互いに連結されていないフィラー粒子11a間のファンデルワールス力のポテンシャルなどが定義される。これらのポテンシャルは、距離又は結合角の関数として具体的に設定され、コンピュータに入力される。

[0034] 図3及び図4は、フィラー粒子11aの結合の説明図である。図3に示すように、フィラー粒子11aを結合させる際には、モデル化領域A2内の外縁部のフィラー粒子11a同士のみを相互に結合させることが好ましい。これにより、フィラーモデル11の作成に要するフィラー粒子11aの結合点数を削減することができるので、演算処理に要する計算時間を短縮することが可能となる。

[0035] また、図4に示すように、フィラー粒子11aを結合させる際には、フィラー粒子11aの中心点P1がモデル化領域A2内に存在するフィラー粒子11aを選定してもよく、中心点P2の一部がモデル化領域A2外に存在するフィラー粒子11bを選定してもよい。このように、モデル化領域A2の境界部で選定するフィラー粒子11aを適宜選択することにより、作成するフィラーモデル11の表面形状を制御することができる。

[0036] 次に、図5A～図5Cを参照して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。図5A～図5Cは、本実施の形態に係るシミュレーション方法の説明図である。なお、図5A～図5Cにおいては、図2A～図2Dと同様に、図1Aに示した略直方体状の計算領域A1の正面の一部を示し

ている。

[0037] 本実施の形態に係るシミュレーション方法は、上述した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。以下においては、図1Bに示した解析用モデル2を用いたシミュレーション方法について説明する。

[0038] 図5Aに示すように、本実施の形態に係るシミュレーション方法では、まず計算領域A1内に、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（不図示）によって構成されるポリマーモデル12を所定密度で充填する。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。ポリマーモデル12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が結合鎖を介して連結されたものである。ポリマー粒子は、複数のポリマー粒子間の結合鎖によって相対位置が特定されている。この結合鎖は、ポリマー粒子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、各ポリマー粒子間を拘束している。結合鎖は、ポリマー粒子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12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12の数値データは、コンピュータに入力される。ポリマーモデル12には、必要に応じてポリマーにフィラーとの親和性を高める変性剤を配合してもよい。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。

[0039] 次に、図5Bに示すように、計算領域A1内に充填されたポリマーモデル12の一部を除去したポリマー除去領域A4を作成する。このポリマー除去領域A4は、上述した解析用モデルの作成方法で作成したフィラーの解析用モデル2に対応した形状を有する領域である。次に、図5Cに示すように、ポリマー除去領域A4にフィラーの解析用モデル2を配置する。次に、フィラーの解析用モデル2とポリマーモデル12との間に相互作用を設定して分

子動力学法を用いて緩和計算及び伸張解析などの変形解析を実行する。

[0040] 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がポリマー粒子間で絡まっても解けやすくなるので、ポリマーモデル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。

[0041] 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6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6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フィラーなど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。

[0042] 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。

[0043] 処理部 5 2 は、モデル作成部 5 2 a と、条件設定部 5 2 b と、解析部 5 2 c とを含む。モデル作成部 5 2 a は、予め記憶部 5 4 に記憶されたデータに基づき、分子動力学法によりポリマーの解析用モデルを作成する際のフィラーなどの特定物質の粒子数、分子数、分子量、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。

[0044] フィラー粒子 1 1 a 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 1 1 a 間の相互作用が一定値になるまで順次、フィラー粒子 1 1 a 間の相互作用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]

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

[0045] モデル作成部 5 2 a 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

5 2 a は、初期条件の設定及び平衡化の計算処理後に、計算領域 A 1 内に解析対象となる特定物質であるフィラーをモデル化するモデル化領域 A 2 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 5 2 a は、モデル化領域 A 2 を計算領域 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く、計算領域 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く、CAD 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。

[0046] 次に、モデル作成部 5 2 a は、設定したモデル化領域 A 2 の全域を含む領域にフィラー原子及びフィラー原子の集合体としてのフィラー粒子 1 1 a を配置する粒子配置領域 A 3 を設定する。ここでは、モデル作成部 5 2 a は、粒子配置領域 A 3 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 5 2 a は、粒子配置領域 A 3 内に指定密度でフィラー粒子 1 1 a を配置してモデル化領域 A 2 内の全域にフィラー粒子 1 1 a を配置する。次に、モデル作成部 5 2 a は、粒子配置領域 A 3 内におけるモデル化領域 A 2 内に配置された複数のフィラー粒子 1 1 a を相互に結合させてフィラーモデル 1 1 を作成してから、粒子配置領域 A 3 外の粒子を削除する。ここでは、モデル作成部 5 2 a は、モデル化領域 A 2 内のフィラー粒子 1 1 a を抽出し、抽出したフィラー粒子 1 1 a を相互に結合してもよく、モデル化領域 A 2 外のフィラー粒子 1 1 a を削除してから残りのフィラー粒子 1 1 a を相互に結合してもよい。また、モデル作成部 5 2 a は、フィラー粒子 1 1 a を結合させる場合には、結合鎖で強固に結合させてもよい。また、モデル作成部 5 2 a は、粒子配置領域 A 3 内にフィラー粒子 1 1 a を配置する際には、モデル化領域 A 2 内に配置したフィラー粒子 1 1 a 間の粒子間距離が、予め定めた所定範囲の距離以下の場合にフィラー粒子 1 1 a 間に相互作用が生じるポテンシャルがフィラー粒子 1 1 a に定義されるようにしてもよい。さらに、モデル作成部 5 2 a は、フィラー粒子 1 1 a を結合させる際には

、モデル化領域A 2内の外縁部のフィラー粒子1 1 a同士のみを相互に結合させてもよい。また、モデル作成部5 2 aは、フィラー粒子1 1 aを結合させる際には、フィラー粒子1 1 aの中心点P 1がモデル化領域A 2内に存在するフィラー粒子1 1 aを選定してもよく、中心点P 2の一部がモデル化領域A 2外に存在するフィラー粒子1 1 bを選定してもよい。

[0048] また、モデル作成部5 2 aは、作成したフィラーモデル1 1とゴム、樹脂、及びエラストマーなどのポリマーを用いたポリマーモデル1 2とを併用して解析を行う場合には、フィラーモデル1 1を作成した後に、計算領域A 1内に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が計算領域A 1内に所定密度で充填してポリマーモデル1 2を作成する。ここでは、モデル作成部5 2 a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。

[0049] 次に、モデル作成部5 2 aは、ポリマーモデル1 2の一部のポリマー粒子を除去してフィラーの解析用モデル2に対応した形状を有する領域であるポリマー除去領域A 4を作成し、作成したポリマー除去領域A 4にフィラーの解析用モデルを配置する。

[0050] 条件設定部5 2 bは、モデル作成部5 2 aで作成したフィラーモデル1 1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分子鎖の位置及び数、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。

[0051] 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 1 1 の挿入により生じた不安定構造を解消し、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。

[0052] 記憶部 5 4 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。

[0053] 記憶部 5 4 には、入力手段 5 3 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。

- [0054] 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。
- [0055] 次に、図 7 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 7 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。
- [0056] 図 7 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をモデル化するためのデータであるフィラーの分子鎖の粒子数、分子鎖数、分子量、分岐、形状、及び大きさ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。
- [0057] 次に、モデル作成部 52a は、仮想空間である計算領域 A1 内にフィラーのモデル化領域 A2 を設定する（ステップ S T 1）。次に、モデル作成部 52a は、モデル化領域 A2 の全域を含む領域であって当該領域内にフィラー原子及び当該フィラー原子の集合体を含むフィラー粒子 11a を配置する粒子配置領域 A3 を設定する（ステップ S T 2）。ここでは、モデル作成部 52a は、粒子配置領域 A3 としては、フィラー粒子 11a の配置効率を向上して計算効率を高める観点から、略直方体状に領域を設定することが好ましい。
- [0058] 続いて、モデル作成部 52a は、粒子配置領域 A3 内に指定密度でフィラー粒子 11a を配置してモデル化領域 A2 内にも指定密度でフィラー粒子 11a を充填する（ステップ S T 3）。ここでは、モデル作成部 52a は、粒子配置領域 A3 内のモデル化領域 A2 内に配置したフィラー粒子 11a 間の粒子間距離が、予め定めた所定範囲の距離以下の場合にフィラー粒子 11a 間に斥力などの相互作用が生じるポテンシャルがフィラー粒子 11a に定義

されるようにしてもよい。これにより、粒子配置領域 A 3 及びモデル化領域 A 2 内に配置されるフィラー粒子 1 1 a が相互に反発して粒子間距離が増大するので、粒子配置領域 A 3 及びモデル化領域 A 2 内に配置するフィラー粒子 1 1 a の数を削減することが可能となり、計算効率が向上する。

[0059] 次に、モデル作成部 5 2 a は、粒子配置領域 A 3 内におけるモデル化領域 A 2 内のフィラー粒子 1 1 a を相互に結合させてフィラーモデル 1 1 を作成する（ステップ S T 4）。また、モデル作成部 5 2 a は、作成したポリマーの解析用モデルのデータを記憶部 5 4 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、フィラーモデル 1 1 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モデル 1 1 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、解析対象となるフィラーなどの特定物質の形状に応じて任意形状のモデル化領域 A 2 を指定するので、複雑な形状を有する特定物質の解析用モデルを正確に作成することが可能となる。これにより、任意形状の解析用モデルを作成できるので、特定物質の材料特性を正確に解析可能な特定物質の解析用モデルの作成方法を実現することが可能となる。しかも、粒子配置領域 A 3 内における作成する特定物質の形状に対応したモデル化領域 A 2 内に配置した粒子を結合させるので、計算領域の全域に粒子を配置する場合と比較して結合させる粒子数を削減することが可能となり、複雑な形状の特定物質の解析用モデルを作成することが可能となる。

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

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

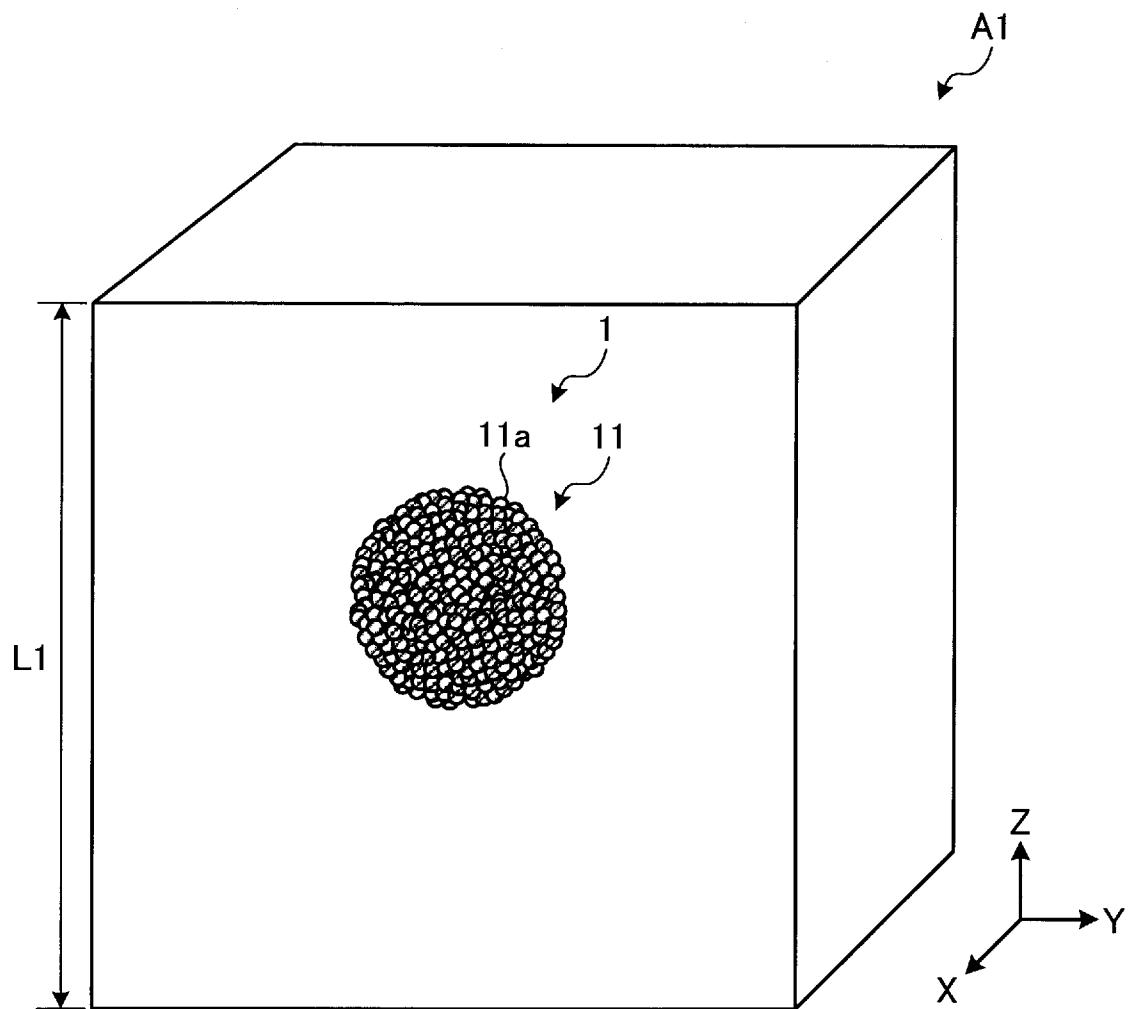
- [請求項1] コンピュータを用いて分子動力学法により特定物質の形状が材料特性に与える影響を解析するためのモデルを作成する特定物質の解析用モデルの作成方法であって、
- 前記特定物質をモデル化するモデル化領域を設定する第1ステップと、
- 前記モデル化領域の全体を含む領域であって、当該領域内に原子及び当該原子の集合体を含む粒子を配置する粒子配置領域を設定する第2ステップと、
- 前記粒子配置領域内に指定密度で前記粒子を配置する第3ステップと、
- 前記粒子配置領域内における前記モデル化領域内に配置された前記粒子を相互に結合させて前記特定物質のモデルを作成する第4ステップとを含むことを特徴とする、特定物質の解析用モデルの作成方法。
- [請求項2] 前記第3ステップにおいて、前記モデル化領域内に配置した前記粒子間の粒子間距離が予め定めた所定範囲の距離以下の場合に、前記粒子間に相互作用が生じるポテンシャルが定義されてなる、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4ステップにおいて、前記モデル化領域内の外縁部の前記粒子同士のみを相互に結合させる、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] 前記特定物質が、フィラーである、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] 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6] 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で作成した特定物質の解析用モデルを、当該特定物質

とは異なる他の特定物質の解析用モデル中に配置し、前記特定物質の解析用モデルと前記他の特定物質の解析用モデルとの間に相互作用を設定して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。

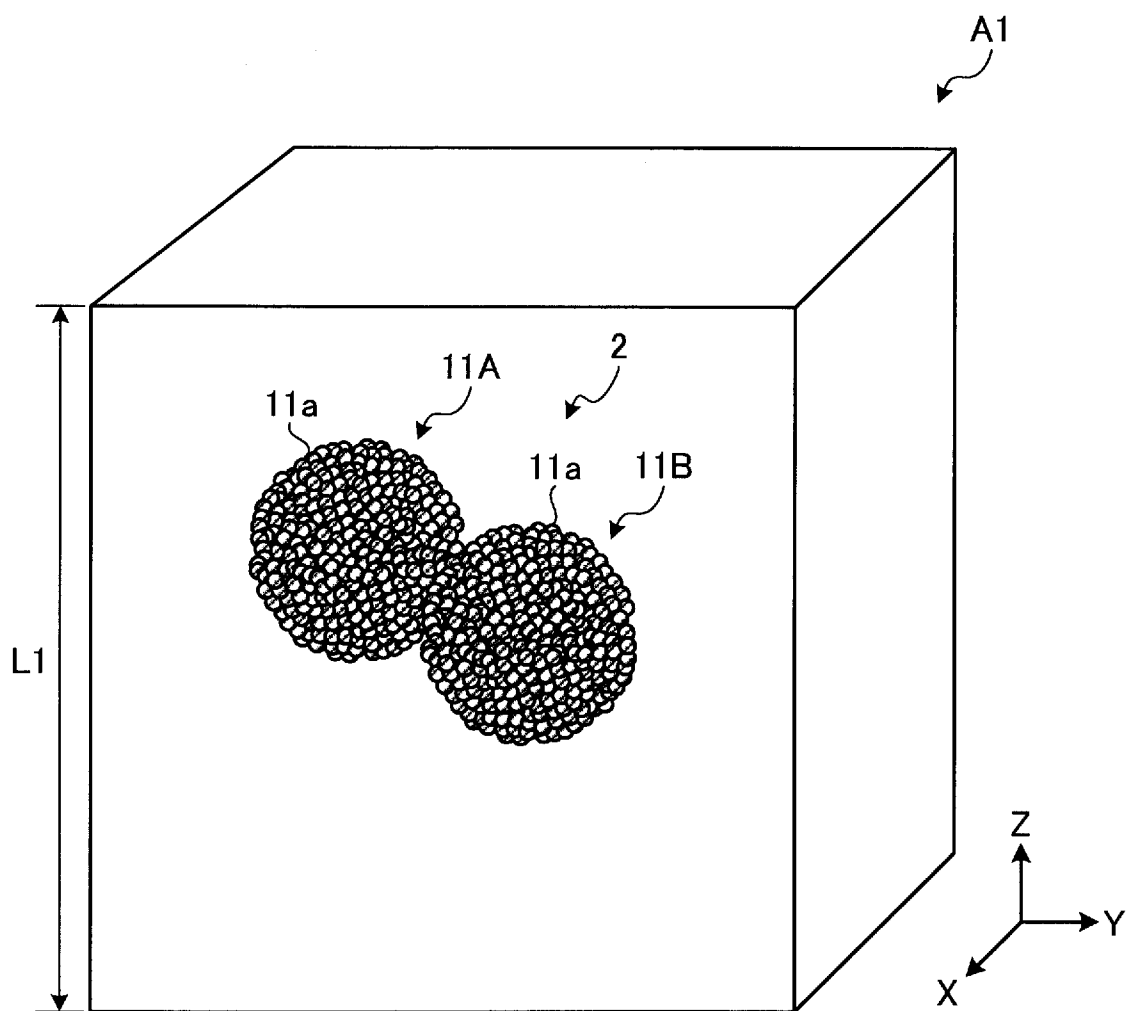
[請求項7] 請求項1から請求項4のいずれか1項に記載の特定物質の解析用モデルの作成方法で作成した特定物質の解析用モデルを用いて変形解析を実行することを特徴とする、特定物質のシミュレーション方法。

[請求項8] 請求項6又は請求項7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。

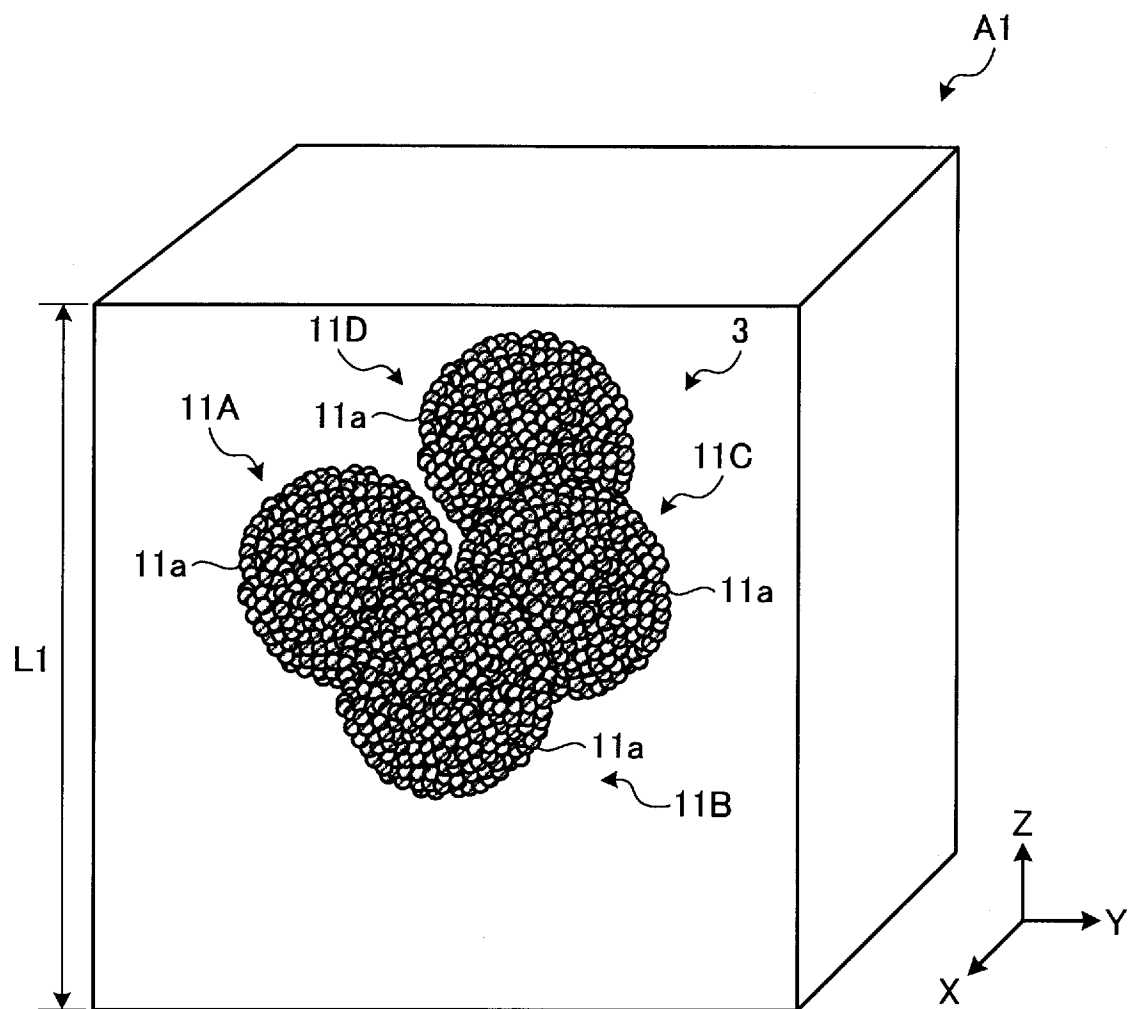
[図1A]



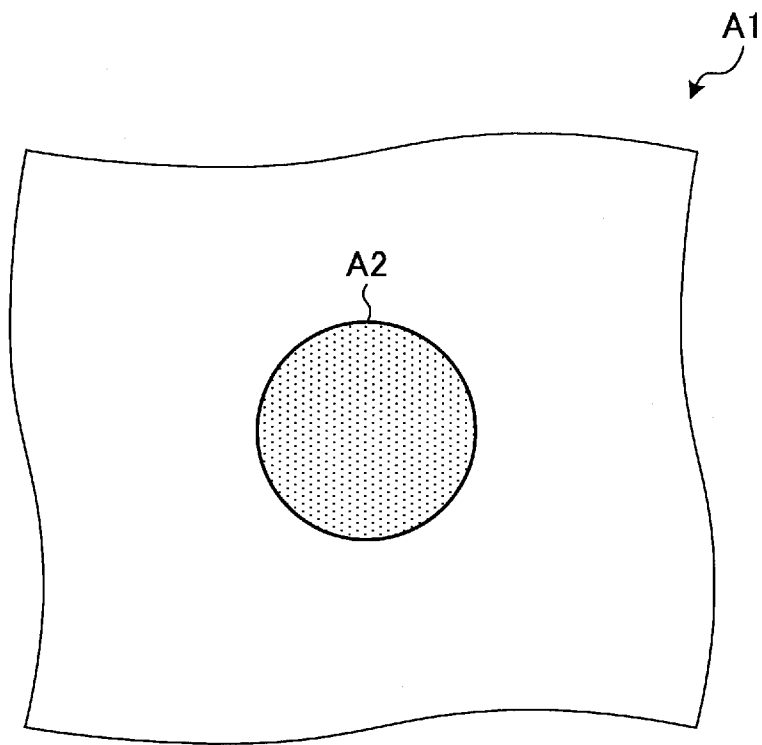
[図1B]



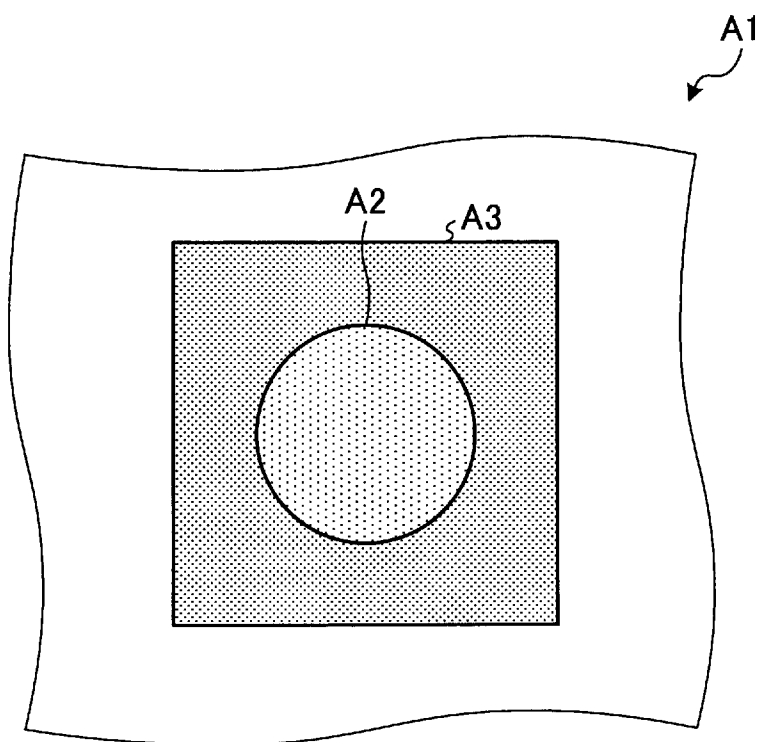
[図1C]



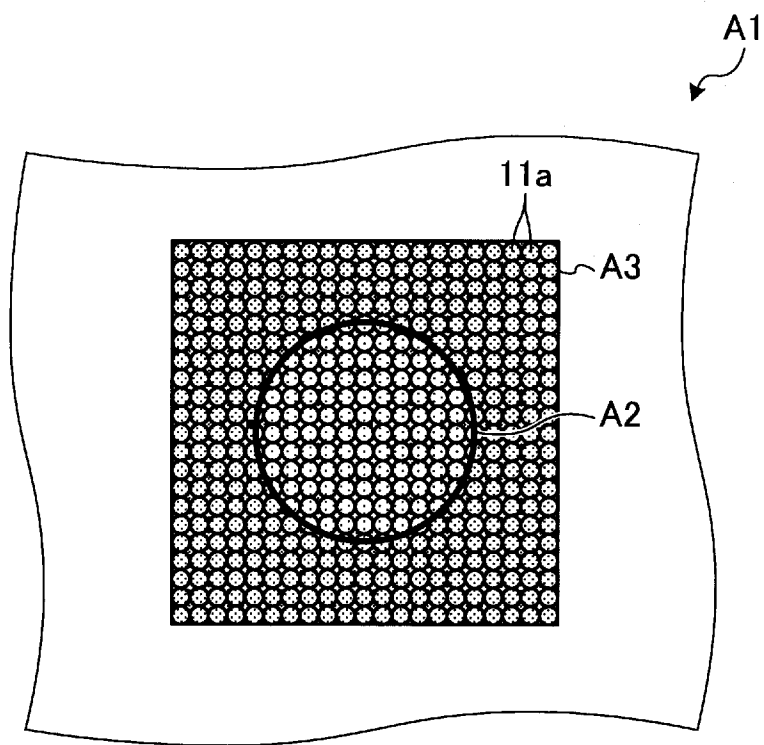
[図2A]



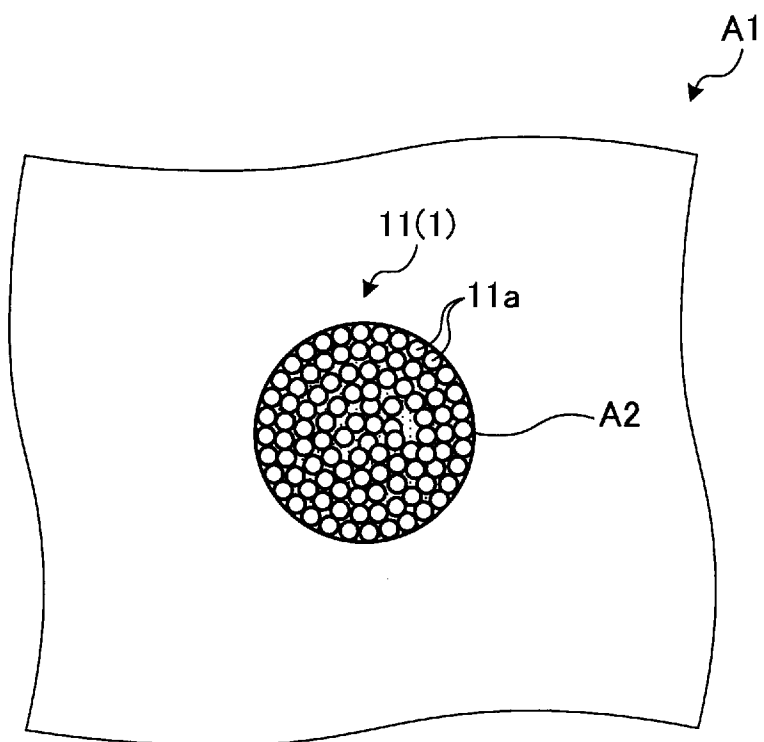
[図2B]



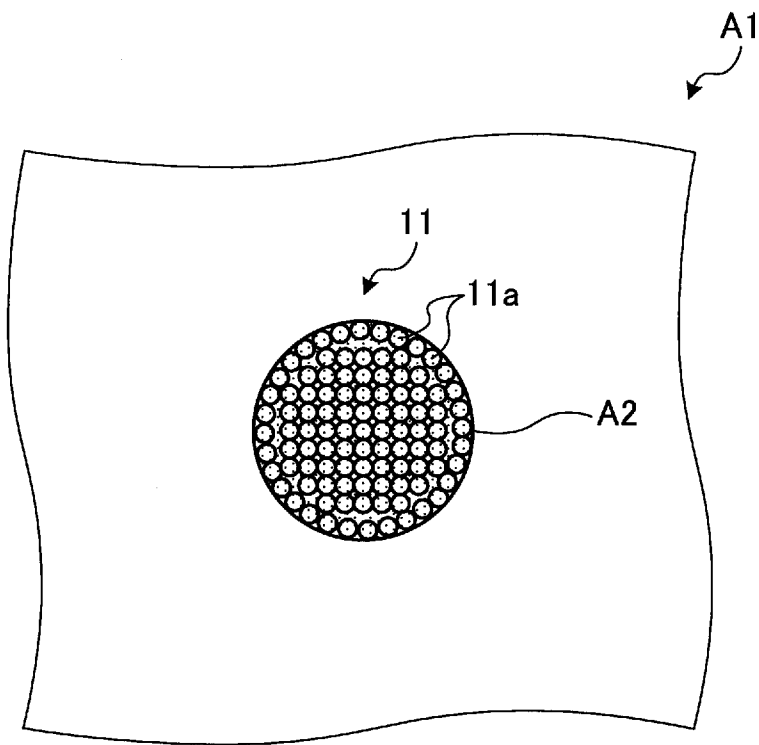
[図2C]



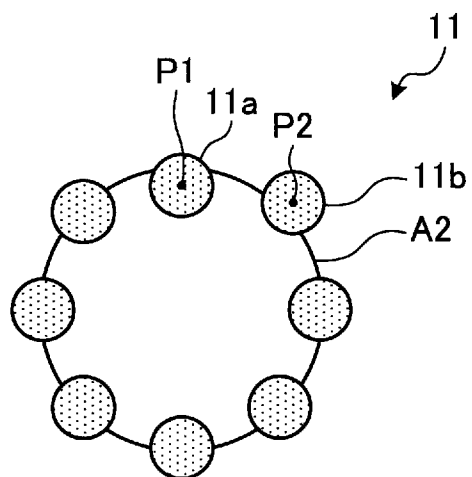
[図2D]



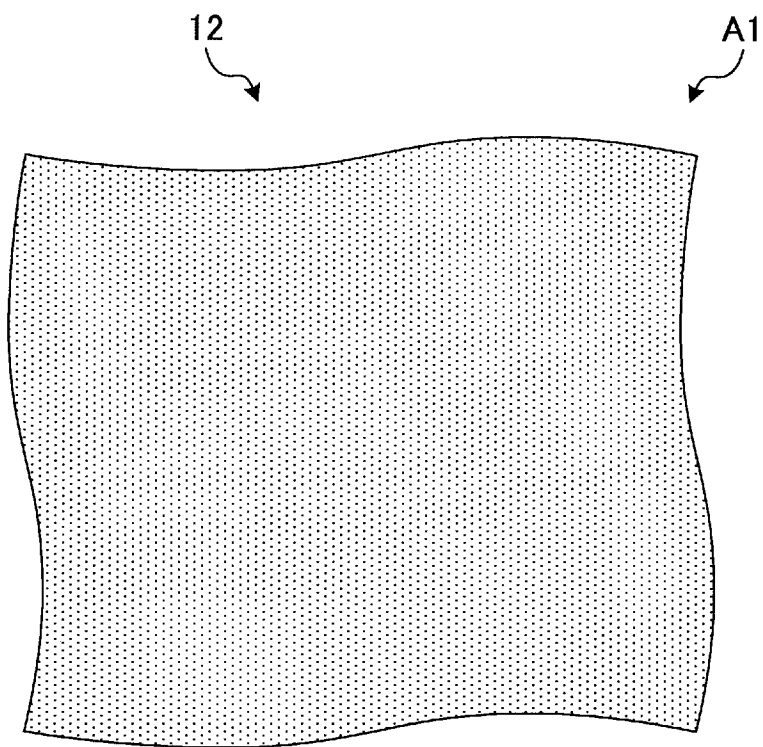
[図3]



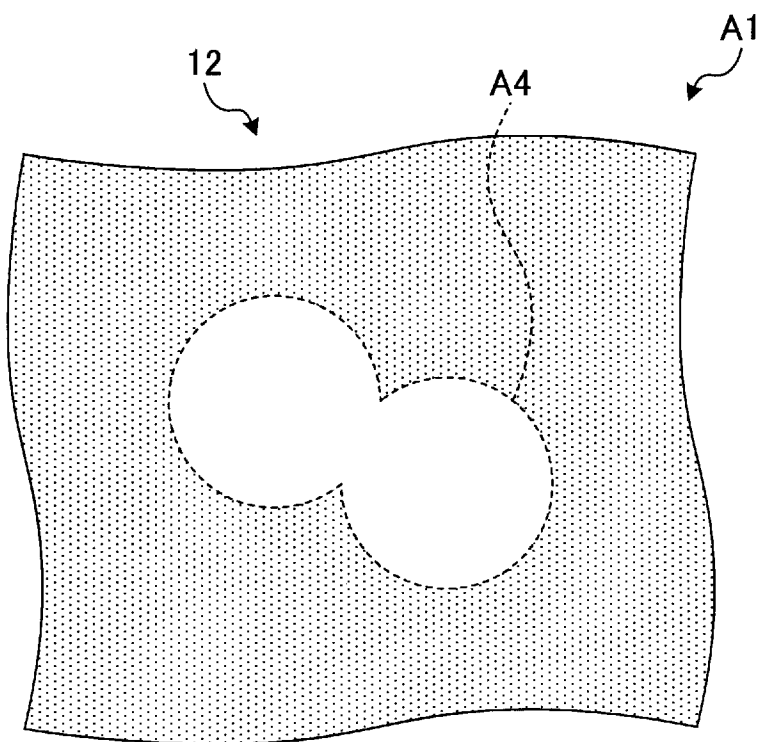
[図4]



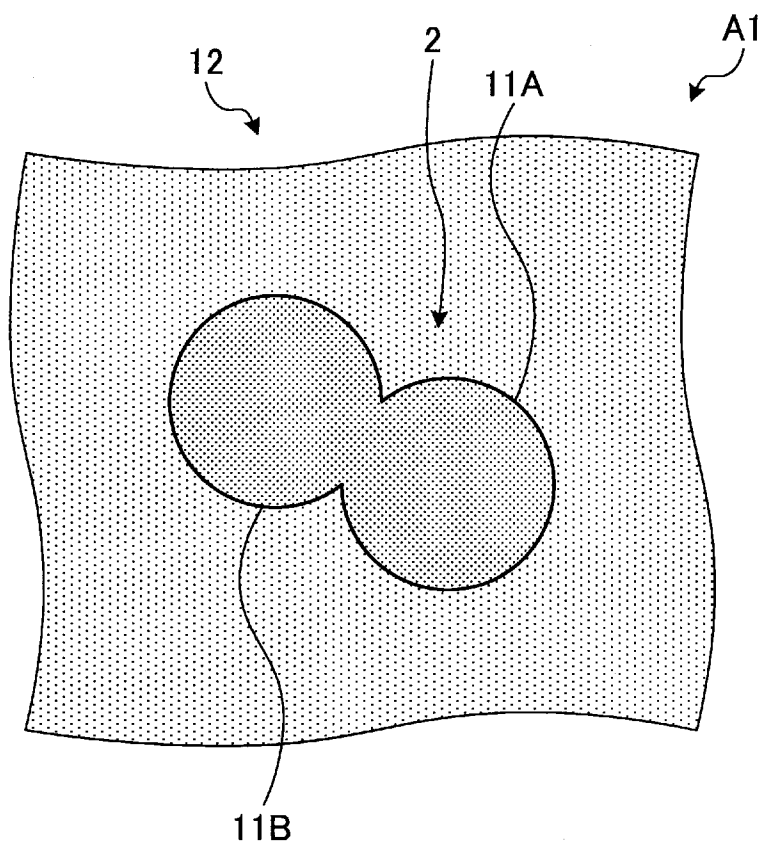
[図5A]



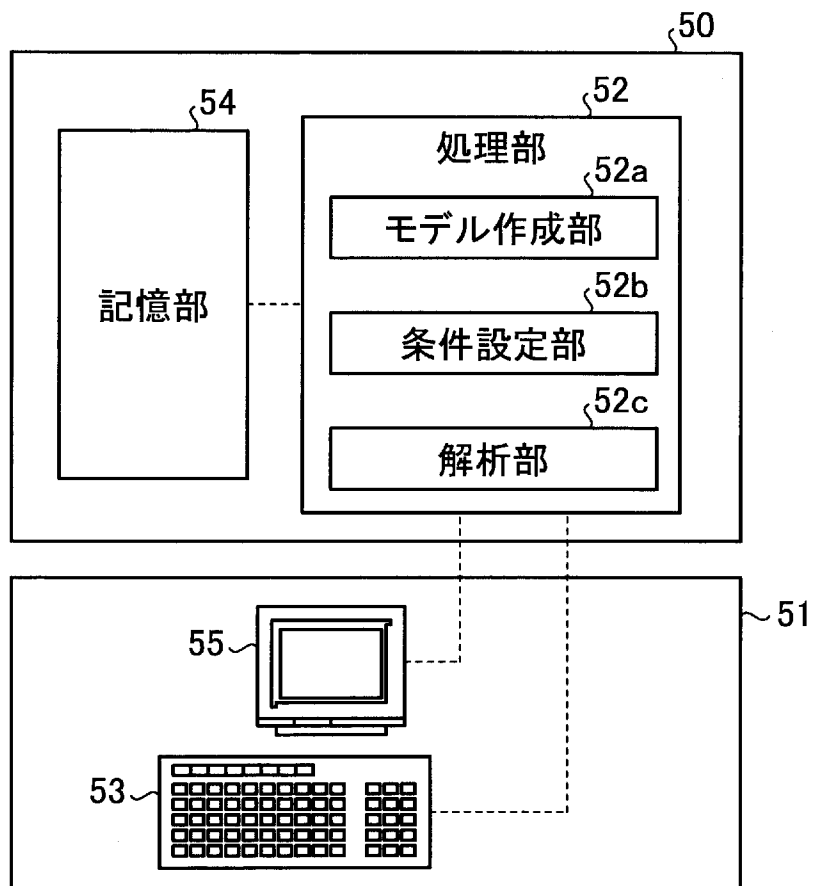
[図5B]



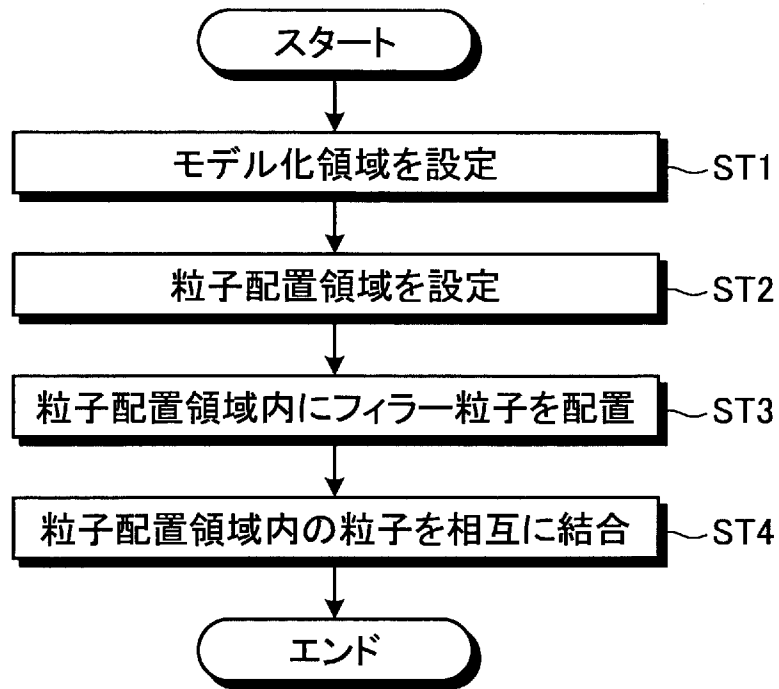
[図5C]



[図6]



[図7]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2015/071041

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.
Y A	JP 2013-89124 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, 4-8 2-3
Y A	WO 2013/077027 A1 (Sumitomo Rubber Industries, Ltd.), 30 May 2013 (30.05.2013), paragraphs [0017] to [0019] & JP 2013-108951 A & US 2014/0297239 A1 & EP 2778678 A1 & KR 10-2014-0095089 A	1, 4-8 2-3

☒ 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/JP2015/071041

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 2009-193290 A (The Yokohama Rubber Co., Ltd.), 27 August 2009 (27.08.2009), entire text; all drawings (Family: none)	1-8

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	1 9 2 2 - 1 9 9 6 年
日本国公開実用新案公報	1 9 7 1 - 2 0 1 5 年
日本国実用新案登録公報	1 9 9 6 - 2 0 1 5 年
日本国登録実用新案公報	1 9 9 4 - 2 0 1 5 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
Y A	JP 2013-89124 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, 4-8 2-3
Y A	WO 2013/077027 A1（住友ゴム工業株式会社）2013.05.30, 段落 [0017]-[0019] & JP 2013-108951 A & US 2014/0297239 A1 & EP 2778678 A1 & KR 10-2014-0095089 A	1, 4-8 2-3
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）	1-8

☐ 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

2 4 . 0 9 . 2 0 1 5

国際調査報告の発送日

0 6 . 1 0 . 2 0 1 5

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 1 0 0 - 8 9 1 5

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

3 3 1 6

電話番号 0 3 - 3 5 8 1 - 1 1 0 1 内線 3 2 5 2